

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**CARACTERIZAÇÃO MORFOTOPOLÓGICA DE ESPAÇOS
POROSOS: RECONSTITUIÇÃO MULTIESCALA E SIMULAÇÃO
DE PROCESSOS DE INVASÃO DE FLUIDOS NÃO-MOLHANTES.**

**TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

CELSO PERES FERNANDES

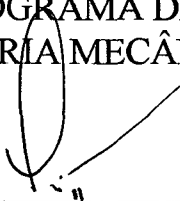
Florianópolis, junho de 1994

CARACTERIZAÇÃO MORFO-TOPOLÓGICA DE ESPAÇOS
POROSOS: RECONSTITUIÇÃO MULTI-ESCALA E SIMULAÇÃO DE
PROCESSOS DE INVASÃO DE FLUIDOS NÃO-MOLHANTES

CELSO PERES FERNANDES

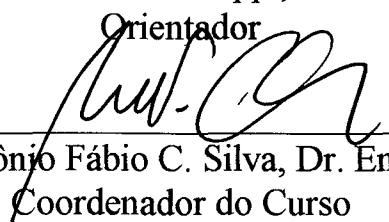
ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE DOUTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA E APROVADA EM
SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA



Prof. Paulo C. Philippi, Dr. Ing.

Orientador



Prof. Antônio Fábio C. Silva, Dr. Eng. Mec.
Coordenador do Curso

Banca Examinadora:



Prof. Paulo C. Philippi, Dr. Ing.



Prof. Sílvio Crestana, Dr.



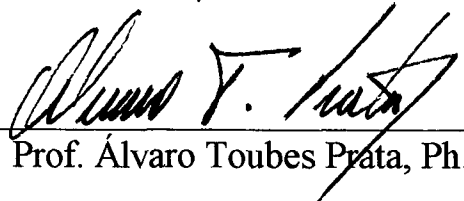
Prof. Krishnaswamy Rajagopal, Ph.D.



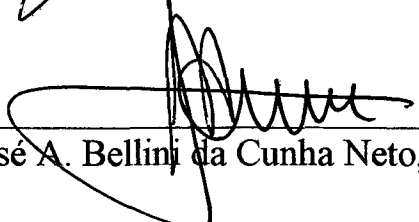
Prof. Marinho B. Quadri, Dr.



Prof. Roberto Lamberts, Ph.D.



Prof. Álvaro Toubes Prata, Ph.D.



Prof. José A. Bellini da Cunha Neto, Dr.

O fácil é o certo, o certo é o fácil
O fácil é o certo

O fácil é o certo, o fácil é fácil
O fácil é o certo

O fácil é o certo, o certo é certo
O fácil é o certo

Titãs em "Tudo ao Mesmo Tempo Agora"

*À Marília de Andrade Araújo
que com sua alegria me estimula à vida.*

*Aos meus pais, Eliézer e Darcy,
que me encorajaram à formação acadêmica.*

Ao meu irmão Edinho, companheiro.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho de tese está inserido na linha de pesquisa "transferência de calor e massa em meios porosos", que vem se desenvolvendo há vários anos no Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas de Materiais (LMPT) do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina. No decorrer destes anos várias pessoas no LMPT têm se dedicado a estudar os problemas envolvendo meios porosos, constituindo, de fato, uma equipe de trabalho bastante integrada.

Trabalhar com o Prof. Paulo César Philippi, orientador desta tese, implica numa relação extremamente profícua e agradável. Pessoa espirituosa, seus pensamentos são externados sempre regados por um riso peculiar. Sua maneira de ser, me permitiu a exclusão de vários "medos". Sou profundamente grato por sua orientação, compartilhamento e confiança em relação ao meu trabalho.

Durante dois anos, o LMPT fez várias tentativas visando a obtenção de micrografias da argamassa utilizada neste trabalho. Isto envolveu várias instituições e pessoas que colaboraram gentilmente. Somos gratos à Embraco, Cenpes-Petrobrás, Ipen-USP e à Comisión Nacional de Energia Atómica de Buenos Aires. As micrografias foram obtidas por Pablo Rosendo Yunes, como parte de sua dissertação de mestrado, com quem tive o prazer de conviver neste período. Sou agradecido ao Pablo por ter me transmitido todas as informações concernentes ao seu trabalho, bem como por tudo que com ele aprendi.

Destaco ainda, na fase de obtenção das micrografias, a participação dedicada do Prof. José Adauto da Cruz e do então acadêmico Aldomar Pedrini, meus grandes companheiros.

Muitas das idéias deste trabalho se concretizaram em função de um convênio de cooperação científica CNPq-CNRS, envolvendo o LMPT, o Institut de Mécanique de Grenoble e o Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse. Sou extremamente grato ao Prof. Jean François Daïan, do Institut de Mécanique de Grenoble, pelas suas idéias, especialmente a de sistemas multiescalas, que constitui uma parte principal deste trabalho. O Prof. Daïan muito me ensinou e é pessoa com quem aprecio o debate de idéias.

Agradecimentos ao então acadêmico Gilberto Pavanelli Júnior, responsável pela implementação do código computacional associado à caracterização morfotopológica da microestrutura da argamassa. O Gilberto foi bastante prestativo e sua colaboração de grande importância para o desenvolvimento deste trabalho.

Meu sentimento de profunda admiração ao Fábio Santana Magnani, com quem tenho convivido esses anos. As discussões que tenho freqüentemente com o Fábio me são de grande valia. Sou grato por sua atenção no trabalho conjunto que realizamos na reformulação da equação que relaciona distribuição de poros com covariograma no sistema multiescala.

Agradeço ao acadêmico Gustavo Rhode pela sua colaboração interessada na implementação do código de simulação de intrusão de mercúrio no sistema multiescala.

Sou grato aos professores Wagner e Nilton Branco, do Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina, por terem me iniciado nos estudos de "Fenômenos Críticos" e "Teoria da Percolação".

Os professores Roberto Lamberts, José A. Bellini da Cunha Neto e Sérgio Colle têm acompanhando o meu trabalho de forma estimulante. A eles o meu sincero agradecimento.

Sou grato aos pesquisadores da Embrapa, especialmente a Sílvio Crestana e Lúcio Jorge pelo interesse demonstrado neste trabalho.

Agradeço aos professores Sílvio Crestana, Krishnaswamy Rajagopal, Álvaro Toubes Prata, Roberto Lamberts, Marinho B. Quadri e José A. Bellini da Cunha Neto por terem aceitado participar da banca examinadora deste trabalho, propiciando um debate bastante profícuo e ao mesmo tempo me sugerindo e estimulando trabalhos futuros.

Exteriorizo meu carinho ao Henor e ao Luís Mauro (o gordo), sempre presentes.

Meus agradecimentos ao simpático pessoal do LMPT: Ricardo, Gilmar, Schuch, Paulo, Diego, Fábio, Nathan, André, Romeu, Liang, Catão, Fernando, Leonardo e os irmãos Perucchi.

Obrigado à sociedade brasileira, representada pelo CNPq, pela concessão de uma bolsa de estudos, permitindo assim a realização deste trabalho.

Muitas outras pessoas participaram de forma direta ou indireta neste trabalho e digo a todos meu muito obrigado.

SUMÁRIO

	p.
SIMBOLOGIA	XIII
LISTA DE FIGURAS	XVII
LISTA DE TABELAS	XXIII
RESUMO	XXIV
ABSTRACT	XXV
 Introdução	 001
 Capítulo 1 - Microestrutura de Materiais Porosos	
1.1 - Introdução	012
1.2. - Métodos de Caracterização de Espaços Porosos	012
1.2.1 - Porosimetria com Intrusão de Mercúrio	012
1.2.2 - Isotermas de Equilíbrio com Vapor de Água	014
1.2.3 - Difusão em Pequenos Ângulos de Nêutrons (SANS) e raios-X (SAXS)	
e Ressonância Magnética Nuclear	014
1.2.4 - Microscopia Conjugada com Técnicas de Análise de Imagens	015
1.3 - Obtenção de Micrografias da Argamassa através de Microscopia Eletrônica	
de Varredura	015
1.3.1 - Confecção das Amostras de Argamassa de Cal e Cimento	015
1.3.2 - Preparação das Amostras para Microscopia e Modo de Operação do MEV	016
1.4 - Micrografias da Argamassa. Observações Qualitativas	017
 Capítulo 2 - Caracterização da Estrutura Porosa de Materiais através de Técnicas	
de Análise de Imagens	
2.1 - Introdução	023

2.2 - Imagens Digitalizadas	024
2.3 - Binarização	024
2.4 - A Função Autocorrelação	028
2.5 - Técnicas de Análise de Imagens	033
2.5.1 - Morfologia Matemática	033
2.5.2 - Operações de Erosão e Dilatação	033
2.5.3 - Aproximação Discreta da Distância Euclidiana	035
2.5.4 - Imagem de Distância ao Fundo	038
2.5.5 - Bolas de Chanfro como Elementos Estruturantes	039
2.5.6 - Operações de Erosão e Dilatação com Elementos Estruturantes d_{3-4} sobre a IDF	040
2.6 - Granulometria. Obtenção da Distribuição Acumulada de Poros	041
2.7 - Obtenção da Frequência de Gargantas	044
2.8 - Considerações Gerais	048
 Capítulo 3 - Caracterização de Invariantes Geométricos de Espaços Porosos	
3.1 - Introdução	050
3.2 - Noção de Dimensão	051
3.3 - A Dimensão de Hausdorff-Besicovitch	052
3.4 - A Dimensão de Bouligand-Minkowski	053
3.5 - Igualdade entre D_f , $\dim(E)$ e $\Delta(E)$	054
3.6. Exemplo de Fractais	055
3.6.1 - Medição do Comprimento de Fronteiras Terrestres e Costas Marítimas. Os Experimentos de Richardson	055
3.6.2 - A Curva de Koch	057
3.6.3 - O Tapete de Sierpinski	058
3.6.4 - Obtenção da Dimensão Fractal através da Relação $M(r) \propto r^{D_f}$	059
3.7 - Determinação Prática da Dimensão Fractal	063
3.7.1 - O Método das Caixas	064

3.7.2 - Obtenção da Dimensão Fractal através da Função Covariograma	066
3.7.3 Análise da Função Distribuição Acumulada de Poros	068
3.8 - Aplicação dos Métodos	069
3.8.1 - Resultados Obtidos para a Pasta de Ligantes	069
3.8.2 - Conclusões sobre os Resultados Obtidos na Pasta de Ligantes	072
3.8.3 - Resultados Obtidos para a Escala das Fissuras	072
3.8.4 - Conclusões Sobre os Resultados Obtidos na Escala de Fissuras	075
3.9 - Considerações Gerais. A Definição da Pasta de Ligantes como um Meio Orbicular	076
 Capítulo 4 - Reconstituição de Estruturas Porosas	
4.1 - Introdução	078
4.2 - Método de Reconstituição de Joshi	080
4.2.1 - Filtro Linear	081
4.2.2 - Filtro Não-Linear	082
4.2.3 - Resolução do Problema Inverso	083
4.3 - Reconstituição da Estrutura da Pasta de Ligantes e da Escala de Fissuras	085
4.3.1 - Pasta de Ligantes	085
4.3.2 - Escala de Fissuras	093
4.4 - Considerações Gerais	095
 Capítulo 5 - Sistemas Multi-Escalas	
5.1 - Introdução	098
5.2 - O Modelo Multi-Escala como Concebido por Neimark (1989)	100
5.3 - O Modelo Multi-Escala de Daian (1992a, 1992b)	102
5.4 - Reconstituição em Sistema Multi-Escala. A Obtenção da Equação Relacionando Covariograma e Fração de Volume por Escala, Daian (1992c)	106
5.4.1 - Determinação do Covariograma de um SME	107

5.4.2. - Obtenção das Frações de Volume v_i a partir do covariograma.	
O Problema Inverso	109
5.5 - Verificação da Equação CVD para um caso Específico de Geração do SME	111
5.6 - Obtenção de uma Nova Equação Relacionando Covariograma e Frações de Volume (CVDM)	113
5.7 - Geração de SME. Comparação dos Covariogramas Calculados por CVD e CVDM com os Covariogramas Medidos	118
5.8 - Resolução do Problema Inverso para CVDM	123
5.9 - A Reconstituição em SME para a Pasta de Ligantes	123
5.9.1 - Conclusões Acerca dos Resultados Obtidos na Reconstituição em SME para a Imagem da Pasta de Ligantes	129
5.10 - Reconstituição em SME para a Imagem de 200X (Rede de Fissuras)	131
5.10.1 - Conclusões para a Reconstituição em SME da Imagem de Aumento de 200X	134
5.11 - Covariograma Total da Composição de duas Escalas	136
5.11.1 - Covariograma Total para o Caso Particular de Imagens a Duas Fases	140
5.12 - Considerações Acerca do Covariograma Total da Composição de Duas Escalas	142
5.13 - Conclusões	143
 Capítulo 6 - Processos de Invasão de Fluido Não-Molhante em Sistemas Multi-Escalas	
6.1 - Introdução	145
6.2 - Fundamentos	145
6.3 - Renormalização	147
6.4 - A Resolução do Problema de Invasão de Mercúrio no SME através da Renormalização. Daian (1992a, 1992b)	149
6.5 - Simulação Numérica do Processo de Invasão de Mercúrio em SME	151
6.6 - Resultados Obtidos na Simulação de Invasão de Mercúrio em SME Tridimensional	157

6.7 - Comparação dos Resultados Simulados com os Experimentais	159
6.8 - Conclusões	162
Capítulo 7 - Conclusões Finais	164
Referências Bibliográficas	167
Apêndice A	177

SIMBOLOGIA

$a(r,s,t)$	coeficientes do filtro linear.
A	designação de um objeto.
B_x	elemento estruturante.
$B_r(x)$	bola de raio r centrada no ponto x .
C_m	Coefficientes da série definida na equação (4.6.).
$c(y)$	parâmetro na equação para o coeficiente C_m .
CC	covariogramas calculados.
CM	covariogramas medidos.
$C_{pp}(u)$	função covariograma do espaço poroso.
$C_{pp}^\alpha(u)$	função covariograma poro-poro na escala α .
$C_{cc}^\alpha(u)$	função covariograma cinza-cinza na escala α .
$C_{pc}^\alpha(u)$	função covariograma poro-cinza na escala α .
$C_{pp}^\beta(u)$	função covariograma poro-poro na escala β .
$C_{pp}^T(u)$	função covariograma poro-poro total.
$d_4, d_8, d_{3-4}, d_{5-7-11}$	designação de métricas definidas no texto.
d	diâmetro, (m); dimensão de um espaço.
D	diâmetro, (m).
D_f	dimensão de massa, dimensão fractal.
$\Delta(E)$	dimensão de Bouligand-Minkowski.
$\dim(E)$	dimensão de Hausdorff-Besicovitch.
E	designação de um objeto.
$E(\ell)$	dilatado do objeto E .
f	função distribuição de intensidades luminosas em uma imagem analógica.
f_A	função obtida integrando-se a distribuição de intensidades luminosas f .
$F(d \leq D)$	fração de volume acumulado de poros de diâmetros d menores ou iguais a D .
$F_Y(y)$	função distribuição do campo gaussiano Y .

$g(\mathbf{r}, p)$	função de conectividade.
g_{lm}	variável de recobrimento parcial.
$H_m(y)$	polinômios de Hermite.
G	Operador não-linear.
K_p	permeabilidade da escala da pasta de ligantes, (m^2).
K_f	permeabilidade da escala das fissuras, (m^2).
k	estágio de invasão de mercúrio.
ℓ, ℓ', ℓ''	comprimentos característicos de escala, (m).
L	comprimento de uma curva, (m).
L_c	comprimento além do qual a correlação se anula, (m).
M	medida de um volume, uma superfície ou um comprimento.
$M(r)$	"massa" contida em uma bola de raio r .
$m^\alpha(E)$	α -medição de recobrimento.
n	número de escalas de um sistema multi-escala.
n_i	múltiplos de fracionamento no sistema multi-escala de Neimark.
N_c	número de células de uma rede.
N	número de células necessárias ao recobrimento de uma imagem.
$N(\ell)$	número de objetos em uma escala de comprimento ℓ .
$n_s(p)$	número de agrupamentos finitos com s sítios ativos.
p	proporção de ocupação.
p_c	limite de percolação.
P_l	pressão do fluido não-molhante (N/m^2)
P_g	pressão do fluido molhante (N/m^2)
P_{cap}	pressão capilar (N/m^2).
P_{itr}	pressão de intrusão do mercúrio, (N/m^2).
P_{li}	pressão de intrusão de mercúrio, (N/m^2).
$P(\mathbf{x})$	função de fase.
$\bar{P}(\mathbf{x})$	função de fase complementar de $P(\mathbf{x})$.
P, Q	pontos de uma imagem discreta.

$P(p)$	probabilidade de um sítio ativo pertencer ao agrupamento percolante em uma ilha infinita.
$P_N(p)$	probabilidade de um sítio ativo pertencer ao agrupamento percolante em uma ilha finita de tamanho N .
r, R	raio, (m).
r	comprimento (m).
r, s, t	deslocamentos na equação do filtro linear.
$R(p)$	função de renormalização.
$R_{pp}(u)$	função autocorrelação do espaço poroso.
$S(p)$	tamanho médio dos agrupamentos finitos
S_p	área associada ao domínio V_p , (m^2).
S	designação de uma imagem.
u	vetor deslocamento com norma u .
u_α, u_β	tamanho das células elementares nas escalas α e β .
$Var\%$	variação percentual.
v	proporção de volume.
$V_p(d \geq D)$	fração de volume acumulado de poros de diâmetros d maiores ou iguais a D .
$Vol_d(E(\ell))$	"volume" do dilatado $E(\ell)$ na dimensão d .
V_p	domínio de superfície.
X, Y, Z	Tipos de células no sistema multi-escala de Neimark, associadas a poro, sólido e cinza, respectivamente.
x_i, y_i, z_i	proporções de ocupação das células dos tipos X, Y e Z , respectivamente no sistema multi-escala de Neimark.
x, y	coordenadas espaciais de um ponto no plano, (m).
x	vetor de posição, (m).
x_j	deslocamento no sistema multi-escala.
$X(x)$	população gaussiana normal não correlacionada.
$Y(x)$	população gaussiana normal correlacionada.

Letras Gregas

α, λ	invariantes em transformação de escala; nome de uma escala.
α	ângulo de contacto.
β	nome de uma escala.
π	proporção de ocupação.
ε	porosidade.
μ	uma unidade de medida genérica.
σ	tensão superficial (N/m).
τ	alcance de correlação, (m).
$\xi(p)$	comprimento de correlação ou de conexão.

Sub-Índices

p	poro.
g	garganta, fluido molhante.
c	cinza.

LISTA DE FIGURAS

p.

Figura I.1.	- Uma rede quadrada de sítios e ligações	004
Figura I.2.	- O comportamento do parâmetro $P(p)$ em uma rede cúbica de ligações	005
Figura 1.1.	- Invasão de mercúrio na cavidade condicionada pela garganta	013
Figura 1.2.	- Micrografia de superfície polida de amostra da argamassa obtida com MEV. Aumento de 50X.	019
Figura 1.3.	- Micrografia de superfície polida de amostra da argamassa obtida com MEV. Aumento de 200X.	019
Figura 1.4.	- Micrografia de amostra fraturada da argamassa obtida com MEV. Aumento de 200X.	020
Figura 1.5.	- Micrografia de superfície polida de amostra da argamassa obtida com MEV. Aumento de 800X.	020
Figura 1.6.	- Micrografia da pasta de ligantes da argamassa. Aumento de 3200X.	021
Figura 1.7.	- Micrografia da pasta de ligantes da argamassa. Aumento de 6400X.	021
Figura 1.8.	- Micrografia da pasta de ligantes da argamassa. Aumento de 12500X.	022
Figura 2.1.	- A imagem digitalizada binária correspondente à micrografia de aumento 200X.	026
Figura 2.2.	- A imagem digitalizada binária correspondente à micrografia de aumento de 3200X.	027
Figura 2.3.	- A função covariograma para a imagem de aumento de 200X.	030
Figura 2.4.	- A função covariograma para a imagem de aumento de 3200X.	031
Figura 2.5.	- Os covariogramas para as quatro rotações para a imagem de aumento de 200X.	032
Figura 2.6.	- Os covariogramas para as quatro rotações para a imagem de aumento de 3200X.	032

Figura 2.7.	- Ilustração da operação de erosão de um objeto por um círculo como elemento estruturante.	034
Figura 2.8.	- Ilustração da operação de dilatação.	034
Figura 2.9.	- Ponderações para deslocamentos associados às métricas d_4 e d_8 .	036
Figura 2.10.	- Ponderações locais para a máscara d_{3-4} .	037
Figura 2.11.	- O chanfro d_{5-7-11} .	037
Figura 2.12.	- A influência da métrica na obtenção da distribuição de poros.	038
Figura 2.13.	- Uma imagem binária e sua codificação em IDF com métrica d_{3-4} .	039
Figura 2.14.	- Comportamento das bolas para as métricas d_4 , d_8 e d_{3-4}	040
Figura 2.15.	- IDF dos elementos estruturantes d_{3-4} com raios de 1 a 3.	040
Figura 2.16.	- A imagem de 3200X submetida a uma operação de abertura.	043
Figura 2.17.	- A função distribuição acumulada de volume de poros para a argamassa	043
Figura 2.18.	- Um esquema para cavidades, garganta e proeminência em um objeto conexo.	044
Figura 2.19.	- Representação esquemática de uma garganta e da bola de raio máximo nela contida.	045
Figura 2.20.	- Erosões sucessivas até o raio de bola que separa o objeto inicial.	045
Figura 2.21.	- Um objeto conexo e a localização aproximada de suas gargantas.	047
Figura 2.22.	- A frequência de gargantas para o objeto da figura 2.19.	047
Figura 2.23.	- O número de gargantas em função do diâmetro para a imagem de aumento de 3200X.	048
Figura 3.1.	- Recobrimento de linhas, superfícies e volumes.	052
Figura 3.2.	- O dilatado de uma curva E.	054
Figura 3.3.	- Medição do comprimento de uma linha bastante recortada com diferentes unidades de medida.	055
Figura 3.4.	- Medição do comprimento de fronteiras terrestres e Costas Marítimas. Os experimentos de Richardson	054
Figura 3.5.	- A geração da curva de Koch.	057
Figura 3.6.	- O tapete de Sierpinski.	059

Figura 3.7.	- Medida da massa no interior de uma bola para a curva de Koch.	059
Figura 3.8.	- Medida da massa no interior de uma bola para o tapete de Sierpinski.	062
Figura 3.9.	- Ilustração para o método das caixas.	064
Figura 3.10.	- O método das caixas aproximado utilizado neste trabalho.	065
Figura 3.11.	- Medição da massa no interior de domínios de tamanho variável.	066
Figura 3.12.	- Resultados do método das caixas para a imagem de aumento 3200X.	069
Figura 3.13.	- A função covariograma na forma logarítmica para a imagem de 3200X.	070
Figura 3.14.	- O volume acumulado de poros $V_p(d \geq D)$ para a argamassa.	071
Figura 3.15.	- O método das caixas para a imagem de aumento de 200X.	073
Figura 3.16.	- A função covariograma na forma logarítmica para a imagem de 200X.	073
Figura 3.17.	- A média dos covariogramas na forma logarítmica para as quatro direções. Imagem de 200X.	074
Figura 3.18.	- Contagem média com o método das caixas para as quatro rotações. Imagem de 200X.	075
Figura 4.1.	- A função $R_{pp}^P = R_{pp}^P(R_{pp}^Y, \varepsilon)$.	084
Figura 4.2.	- A imagem reconstituída para a pasta de ligantes.	088
Figura 4.3.	- Comparação dos covariogramas das imagens de 3200X e reconstituída 2D pelo método de Joshi.	089
Figura 4.4.	- As distribuições acumuladas de poros para a imagem de 3200X e sua reconstituída pelo método Joshi.	089
Figura 4.5.	- A influência do gerador randômico sobre o processo de reconstituição.	090
Figura 4.6.	- Comparação dos covariogramas das imagens de 3200X e reconstituída 3D pelo método Joshi.	091
Figura 4.7.	- A variação de porosidade por seções na imagem reconstituída 3D para a pasta de ligantes.	092
Figura 4.8.	- Os covariogramas para várias seções do cubo gerado.	092
Figura 4.9.	- A imagem reconstituída para o complexo de fissuras.	093
Figura 4.10.	- Os covariogramas para três gerações da imagem associada ao aumento de 200X.	094

Figura 4.11.	- Comparação das médias dos covariogramas medidos e gerados. Imagem de 200X.	094
Figura 4.12.	- As distribuições de volumes de poros original e gerada.	095
Figura 5.1.	- O processo de construção do SME de Neimark (1989).	101
Figura 5.2.	- A composição do SME de Daian.	104
Figura 5.3.	- O agrupamento de células da classe i formando uma célula da classe $i-1$.	107
Figura 5.4.	- Uma célula de tamanho d_i conduzida a um deslocamento x_j .	107
Figura 5.5.	- Um exemplo de SME a duas escalas.	113
Figura 5.6.	- Representação de uma parte de um SME composto de três escalas.	122
Figura 5.7.	- Comparação dos volumes gerados no SME 2D e originais para a imagem de 3200X com entrada por fração de volume.	124
Figura 5.8.	- Comparação dos covariogramas gerados em SME 2D e original com entrada por fração de volume.	124
Figura 5.9.	- Um exemplo de reconstituição em SME para a imagem de 3200X.	125
Figura 5.10.	- Imagem binária de uma areia de "Fontainebleau".	126
Figura 5.11.	- Os resultados de distribuição de poros original e gerado em SME para a areia de "Fontainebleau".	127
Figura 5.12.	- Os covariogramas original e gerado em SME para a areia de "Fontainebleau".	127
Figura 5.13.	- Comparação da distribuição de volumes original e gerada no SME 2D com entrada por covariograma. Imagem de 3200X.	128
Figura 5.14.	- Os covariogramas gerados e original para a imagem de 3200X reconstituída 2D com entrada por covariograma.	129
Figura 5.15.	- As distribuições de volumes original e gerada para a reconstituição SME da imagem de 200X. Entrada por volume.	132
Figura 5.16.	- Os covariogramas gerado e original para a reconstituição em SME da imagem de 200X. Entrada por volume.	132
Figura 5.17.	- As distribuições de volume original e gerada em SME para a imagem de 200X. Entrada por covariograma.	133

Figura 5.18.	- Os covariogramas original e gerado no SME para a imagem de 200X. Entrada por covariograma.	133
Figura 5.19.	- O aspecto de uma reconstituição em SME para a imagem de 200X.	134
Figura 5.20.	- A reconstituição de uma fissura em SME.	135
Figura 5.21.	- Modelo estrutural para a composição de covariogramas.	137
Figura 6.1.	- A invasão de mercúrio no espaço poroso.	146
Figura 6.2.	- Ilustração para o procedimento de renormalização.	147
Figura 6.3.	- As configurações possíveis para os sítios ativos no agrupamento, dadas por uma simples regra de renormalização.	148
Figura 6.4.a.	- O primeiro estágio de invasão no SME.	154
Figura 6.4.b.	- O segundo estágio de invasão no SME.	155
Figura 6.4.c.	- O terceiro estágio de invasão no SME.	156
Figura 6.4.d.	- O quarto estágio de invasão no SME.	157
Figura 6.5.	- Comparação dos volumes originais e gerados em SME para redes 128x128x128 e 256x256x256.	158
Figura 6.6.	- Os covariogramas medidos no SME tridimensional e na imagem original de aumento de 3200X.	158
Figura 6.7.	- O volume de mercúrio invadido no SME da pasta de ligantes.	159
Figura 6.8.	- Resultados experimentais e da simulação de invasão de mercúrio em SME da pasta de ligantes. Todo o espaço poroso da imagem de aumento de 200X é suposto conectado.	161
Figura 6.9.	- Resultados experimentais e da simulação de invasão de mercúrio em SME da pasta de ligantes. Os macroporos da imagem de aumento de 200X é conectado depois da etapa de percolação na pasta de ligantes.	161
Figura 6.10.	- O comportamento da invasão de mercúrio em simulações no SME e em rede randômica de percolação.	162
Figura A.1.	- O cálculo da distância entre dois pontos P e Q com o uso da máscara d_{3-4} .	177
Figura A.2.	- Decomposição da máscara d_{3-4} nas semi-máscaras anterior e posterior.	178

Figura A.3.	- Os percursos anterior e posterior para a determinação de IDF.	179
Figura A.4.	- O chanfro d_{3-4} .	180
Figura A.5.	- Representação de uma bola d_{3-4} de raio 2.	181

LISTA DE TABELAS

	p.
Tabela 4.1 - Solução do filtro linear para a imagem de 3200X	088
Tabela 5.1 - Comparação dos covariogramas medidos e calculados	112
Tabela 5.2 - Quatro casos de distribuição de volumes para geração de SME	118
Tabela 5.3 - Os valores de covariograma calculados e medidos	119
Tabela 5.4 - Variação percentual dos covariogramas calculados em relação aos medidos	121
Tabela 6.1 - As frações de volume para a imagem da pasta de ligantes	152

RESUMO

Os fenômenos físicos que ocorrem em materiais porosos são fortemente dependentes da sua microestrutura. Assim, o interesse primeiro deste trabalho de tese consiste na caracterização da morfologia (distribuição de tamanho de poro) e da topologia (a conectividade entre os poros) de materiais porosos. O estudo dos fenômenos físicos é considerado sob a seguinte ótica: descrição morfotopológica do espaço poroso, aliada às leis físicas fundamentais que envolvem os fenômenos a um nível microscópico. Tem-se aqui, como material objeto de estudo, uma argamassa de cal e cimento, utilizando-se contudo uma metodologia bastante geral.

A primeira parte desse trabalho trata da determinação de aspectos estatísticos considerados relevantes do espaço poroso. Isto é feito, utilizando-se técnicas de análise de imagens (digitalizadas e binárias) obtidas a partir de observação microscópica. Numa segunda etapa, procura-se obter uma representação geométrica tridimensional do espaço poroso, conservando as características estatísticas medidas nas imagens bidimensionais. Para tanto, estudam-se dois processos de reconstituição de estruturas porosas: um primeiro, onde o espaço poroso é reconstituído em um sistema, constituído de uma única escala, a partir do conhecimento da porosidade e da autocorrelação; o segundo processo envolve o conceito de sistemas multiescalas. A atenção é voltada para o modelo multiescala, que permite a reconstituição a partir da função distribuição de volumes de poros, conservando a autocorrelação. A reconstituição em sistema multiescala se apresenta realizável tendo-se como dados de entrada os valores de autocorrelação. Duas equações são propostas, demonstrando-se, para o sistema multiescala, uma relação biunívoca entre a distribuição de poros e a autocorrelação. Finalmente, sobre imagens reconstituídas em sistema multiescala simulam-se processos de intrusão de mercúrio. Os resultados obtidos são cotejados aos experimentais, mostrando uma concordância bastante boa. A comparação com simulações em redes randômicas de percolação demonstra que o modelo geométrico de sistema multiescala representa melhor a topologia do meio real.

ABSTRACT

Physical phenomena inside porous media are strongly dependent on their microstructure. In this way, the main interest of the present work is to describe the morphology (pore size distribution) and topology (connectivity) of porous media. Physical phenomena inside porous material is considered using the following reasoning: morpho-topological description of the porous space, related to the fundamental physical laws at the pore level. A lime and cement mortar is used in the study, although the method presently exposed is completely general. The first part of this work considers the statistical description of the porous space, performed using image analysis methods over digitized files obtained from pictures of polished porous samples. In the second part, a 3D geometrical representation is obtained conserving the statistical properties of the porous space. Two 3D reconstitution methods are considered: in the first method the porous structure is reconstituted at a single scale, using the porosity and self-correlation function as input parameters; the second one is a multi-scale reconstitution method. Attention is paid to the multi-scale method which enables the reconstitution of the porous space starting from the pore size distribution, but conserving the self-correlation function. It is shown that the multi-scale reconstitution is possible, starting from the values of the self-correlation function. Two equations are proposed and a one to one relation is demonstrated between the pore size distribution and the self -correlation function. In the last part, mercury intrusion is simulated using multi-scale systems. The results are compared with experimental values, showing a very good agreement. Comparison with random networks shows that the geometrical model using multi-scale systems gives a better description of the topological porous space.

INTRODUÇÃO

A descrição dos fenômenos de transferência de calor e massa em materiais porosos é realizada por várias teorias fenomenológicas, com uma abordagem macroscópica, dentre as quais citam-se: Luikov (1966), Philip e De Vries (1957), De Vries (1958). Essas teorias se baseiam em um modelo de meio poroso contínuo onde as variáveis locais são identificadas por valores médios sobre um volume elementar representativo. Nesta maneira de se considerar o problema, o meio poroso é visto em uma escala tal que se possa assumi-lo homogêneo. São derivadas equações descrevendo a transferência de calor e massa, dependentes de coeficientes de transferência, equações estas que são acopladas. O estudo assim posto, consiste na determinação experimental dos coeficientes de transferência, visando em última análise a resolução do sistema de equações acopladas.

Processos de fixação de umidade em materiais porosos também são estudados sob a ótica macroscópica. Consiste na caracterização experimental do comportamento do meio poroso, frente ao vapor de água em condições de equilíbrio. São derivadas dessa forma as isotermas experimentais de equilíbrio em processos de condensação (adsorção) e evaporação (dessorção).

Vários autores se valeram desta linha de pensamento, realizando estudos experimentais sobre os fenômenos de fixação e transferência de massa (isotérmicos ou não). Dentre eles citam-se: Van der Kooi (1971), Jury (1973), Crausse (1983), Perrin (1985), Daïan (1986), Merouani (1987), Quadri (1988), Fernandes (1990) e Cunha Neto (1992).

Por outro lado, as propriedades físicas dos materiais num senso geral (mecânicas, térmicas, hídricas, etc.) são decorrentes de sua formação microestrutural. Tome-se por exemplo a permeabilidade, que é definida como um fator de proporcionalidade na lei de Darcy: ela é um parâmetro fortemente dependente da geometria do espaço poroso (Delfiner et alii, 1972). Os processos de dessorção de vapor de água e de intrusão de mercúrio são demonstrados ser influenciados pela geometria do espaço poroso. O termo geometria do espaço poroso engloba dois aspectos: o morfológico, associado à distribuição de tamanho de poros, e o topológico, designando a conectividade entre os poros.

Um outro enfoque é então considerado para o estudo dos fenômenos físicos que ocorrem em meios porosos. Consiste na descrição da morfologia e da topologia do espaço poroso aliada às leis físicas que envolvem os fenômenos a um nível microscópico.

Salienta-se que os primeiros trabalhos com este enfoque não consideram a conectividade entre os poros. Modelos de espaço poroso construídos dessa forma são chamados de "poros independentes". O espaço poroso é assumido ser constituído de um conjunto de poros paralelos de diâmetros diferentes, conectados individualmente à superfície do material. O modelo BJH — devido a Barret, Joyner e Halenda (1951) — permite calcular o conteúdo total de água em adsorção (água adsorvida fisicamente e condensada capilarmente) a partir de uma dada distribuição de poros. Assume-se uma geometria para os poros (em geral cilíndrica) e a hipótese de poros independentes. Com a hipótese de poros independentes o modelo BJH não consegue prever a histerese que se observa experimentalmente nas isotermas de adsorção/dessorção. A interpretação clássica das curvas de intrusão de mercúrio também assume a hipótese de poros independentes, e esta questão será brevemente revista no capítulo 1.

Mencionam-se, também, os trabalhos pioneiros de Childs e Collis-George (1950) e de Marshall (1958), que obtêm equações relacionando a permeabilidade de materiais porosos com sua distribuição de tamanho de poros.

No contexto dessa visão do estudo, destacam-se mais recentemente os modelos de redes randômicas juntamente com a teoria da percolação. Não se fará neste trabalho uma revisão sistemática da teoria da percolação, limitando-se tão somente a breves considerações. Um tratado sobre esta teoria pode ser encontrado em Stauffer (1985).

Broadbent e Hammersley (1957) introduziram a teoria da percolação. Esses autores se valeram da expressão "processos de percolação" no intuito de descrever a passagem de um fluido através de um filtro parcialmente obstruído — citação em Souza (1993). Os processos de percolação diferem dos de difusão, uma vez que, na percolação o meio desempenha um papel ativo, enquanto que na difusão o meio se apresenta de forma passiva. De fato, nos processos difusivos a randomicidade está associada às partículas que compõem o fluido, não importando o meio. Na percolação o meio desempenha um papel ativo, e a randomicidade a ele atribuída, comanda a movimentação das partículas de fluido (Posadas Durand, 1994). A partir do artigo

de Broadbent e Hammersley (1957), vários autores têm-se ocupado em estudar a teoria propriamente dita, bem como suas implicações em fenômenos físicos. O número de autores é bastante grande, e dentre eles citam-se: Fisher e Essam (1961), Sykes e Essam (1963, 1964a, 1964b), Shante e Kirkpatrick (1971), Kirkpatrick (1973), Essam(1980) e Stauffer (1985).

Para que se possa entender a noção básica da teoria da percolação, consideremos um exemplo simples. Consiste de uma caixa contendo uma mistura de grãos que podem ser condutores (eletricamente) ou isolantes, distribuídos randomicamente no volume da caixa. É intuitivo que, se a mistura possui poucos grãos condutores ela se comportará como um meio isolante. De outra forma, se a mistura possuir poucos grãos isolantes ela se comportará como um meio condutor. Vem então a pergunta: qual deve ser a fração de grãos condutores (isolantes) que a mistura deve apresentar de forma a se comportar como um meio condutor (isolante)?. O aspecto interessante da teoria da percolação reside no fato de que a passagem de um estado do sistema para outro (isolante para condutor, ou o contrário) se faz de forma abrupta, em um valor preciso da percentagem de grãos condutores (ou isolantes) presente na mistura. Esta percentagem de mudança de estado do sistema se denomina limite de percolação.

O ponto de partida da teoria da percolação consiste na consideração de redes, em geral regulares, constituídas de pontos denominados sítios e da conexão entre eles através de elementos chamados de ligações. A consideração dessas redes tem por objetivo modelar geometricamente um sistema real em estudo. A teoria foi inicialmente desenvolvida para sistemas infinitos. A quantidade de ligações deixando cada sítio é denominada de número de coordenação, Z . A ilustração de uma rede quadrada de sítios e ligações ($Z=4$) pode ser vista na figura I.1.

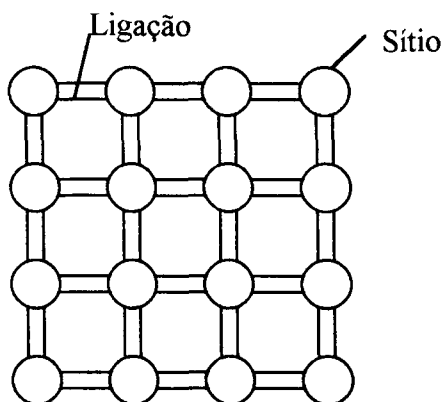


Figura I.1. Uma rede quadrada de sítios e ligações.

Os sítios e ligações da rede podem estar ativos (ou ocupados) com uma probabilidade p . Pode-se considerar ainda em uma rede de sítios e ligações os problemas de percolação de sítios, de ligações ou a mista (sítios e ligações). Na percolação de sítios todas as ligações estão ativas, indicando apenas a forma de união entre os sítios. Na de ligações, todos os sítios estão ativos e denotam apenas o ponto de encontro das ligações. Finalmente, na percolação mista tanto sítios quanto ligações podem ou não estar ativas, podendo ambos se caracterizarem como restrições. Para o exemplo dado acima da caixa contendo grãos, o sistema pode ser representado por uma rede cúbica de sítios, onde os sítios procuram representar os grãos, que podem ser ativos (condutores) ou não ativos (isolantes). Em uma rede, por exemplo para a percolação de sítios, à medida que se aumenta a proporção p vão se formando agrupamentos (ilhas) de sítios conectados de tamanho finito. Para um dado valor de p , p_c , o limite de percolação, um único agrupamento de tamanho infinito é formado, atravessando todo o sistema e diz-se que neste ponto o sistema percolou. O limite de percolação depende do número de coordenação e da dimensão da rede. Quando se consideram sistemas constituídos de redes grandes, porém finitas, o valor de p_c dependerá adicionalmente do tamanho da rede. Para o limite de percolação ainda existem agrupamentos finitos, e quando p é incrementado além de p_c até 1, mais sítios se tornam ativos incorporando à ilha infinita mais ilhas finitas cujos tamanhos vão a zero. Define-se um parâmetro, $P(p)$, que dá a probabilidade de um sítio arbitrário da rede ser ativo e pertencer à ilha infinita, para cada proporção de ocupação p . Este parâmetro é nulo para valores de p inferiores a p_c , aumentando até a unidade quando $p=1$, veja-se ilustração na figura I.2.

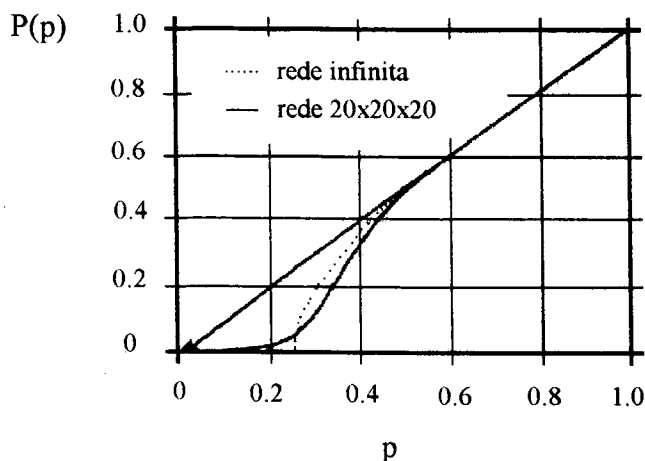


Figura I.2. O comportamento do parâmetro $P(p)$ em uma rede cúbica de ligações. Extraído de Daian (1992a).

A teoria da percolação se ocupa em descrever estatisticamente os agrupamentos em função da proporção de ocupação p e principalmente o comportamento do sistema na vizinhança do limite de percolação. Além de $P(p)$ são introduzidos outros parâmetros caracterizando os agrupamentos do sistema. Define-se o parâmetro $n_s(p)$, que fornece o número de agrupamentos que contêm s sítios ativos. Outros parâmetros importantes são $S(p)$ que dá a informação sobre o tamanho médio dos agrupamentos de sítios ativos e a função de conectividade $g(r,p)$ que representa a probabilidade de que um sítio ativo esteja conectado a outro sítio ativo pertencente ao mesmo agrupamento e a uma distância r .

A teoria da percolação pode ser considerada como um caso particular (no sentido de ser constituída de sistemas puramente geométricos) de idéias mais gerais contidas na teoria de transição de fase (Essam, 1980). A transição de um estado não percolante a um percolante denota uma espécie de transição de fase. A teoria de transição de fase procura descrever o comportamento dos sistemas, na vizinhança do ponto de transição, através de "leis de escala", associadas a "expoentes críticos".

A representação do espaço poroso através de redes randômicas de percolação de sítios e ligações — onde os sítios procuram representar as cavidade e as ligações as gargantas (estreitamentos) entre cavidades — tem sido utilizada por vários autores, objetivando a simulação de vários fenômenos físicos. Citam-se os trabalhos de Chatzis e Dullien (1977, 1982),

Wall e Brown (1981), Lenormand (1981), Mason (1982, 1988), Parlar e Yortsos (1988), Quenard (1989), Saliba (1990), Souza (1993).

Um aspecto é comum nesses trabalhos: os modelos de rede são randômicos, não correlacionados espacialmente. Em geral adota-se um tipo de rede regular, 2D ou 3D, o que implica em um número de coordenação fixo para toda a estrutura, e procura-se manter uma dada distribuição de poros, ocupando-se aleatoriamente os elementos da rede.

Contudo, como será visto neste trabalho, o espaço poroso de muitos materiais apresenta uma correlação espacial. Assim é com materiais a base de ligantes hidráulicos cujo processo de formação não dispõe os poros randomicamente, mas sim correlacionados espacialmente (a função de correlação será introduzida no capítulo 2).

Motivado pelo arranjo estrutural de solos argilosos, que produz em determinadas condições um meio fissurado correlacionado espacialmente, Renault (1988, 1991) estudou o limite de percolação para vários tipos de redes regulares que apresentam correlação espacial.

No que tange aos estudos em materiais porosos, aliando geometria da microestrutura e leis físicas a nível microscópico, acredita-se que a introdução da variável de correlação espacial (o que implica em uma dada conectividade) são fundamentais para a compreensão de muitos fenômenos físicos. Isto a nosso ver, significa que se está iniciando uma tentativa de descrever a microestrutura de modo mais fiel ao meio real.

A preocupação primeira deste trabalho de tese consiste na caracterização da morfologia (distribuição de tamanho de poro) e da topologia (a conectividade entre os poros) de materiais porosos, através de imagens digitalizadas obtidas a partir de observação microscópica.

O material objeto de estudo — muito embora a metodologia utilizada seja bastante geral — consiste de uma argamassa de cal e cimento, comumente utilizada no Brasil em revestimento interno de edificações. Este material vem sendo estudado (do ponto de vista hídrico e térmico) a vários anos no Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas de Materiais (LMPT) pertencente ao Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina. Esta pesquisa é motivada pelo fato de os materiais constituintes das edificações apresentarem um comportamento fortemente dependente de suas propriedades de fixação e transferência de umidade. Os efeitos produzidos pela presença de umidade são vários: alteração

da resistência mecânica e durabilidade, zonas de dilatação térmica diferenciada, estéticos, etc. Também, a resistência térmica e a permeabilidade ao vapor de água são função do conteúdo de umidade, influenciando o balanço de energia e o conforto térmico.

A argamassa, como outros materiais a base de aglomerantes hidráulicos, apresenta uma distribuição de poros bastante larga: os diâmetros de poros variam de algumas dezenas de Ångström a vários micrometros. Ela é um material constituído de grãos de areia agregados por uma pasta de ligantes (cimento, cal e água) de textura bastante fina. Além disso, principalmente ao redor dos grãos de areia, se apresenta uma complexa rede de fissuras.

Este trabalho de tese considera duas escalas principais na tentativa de descrever a microestrutura da argamassa: uma primeira escala associada ao complexo de fissuras, e uma segunda escala correspondente aos poros da pasta de ligantes.

Seguindo Auriault e Boutin (1992) considera-se a argamassa como um material de dupla porosidade, no sentido de distinguir a escala do complexo de fissuras da dos poros da pasta de ligantes. O conceito de dupla porosidade é introduzido, uma vez que as permeabilidades K_f e K_p , das fissuras e dos poros da pasta, respectivamente, são bastante diferentes, com $K_f \gg K_p$. A principal questão aqui envolvida, é a de que as fissuras são objetos geométricos que devem ser tratados de forma diferenciada em relação aos poros da pasta ligantes, quando se pensa na simulação de fenômenos físicos.

A escala das fissuras é admitida possuir um comprimento característico ℓ' enquanto que os poros da pasta de ligantes apresenta um comprimento ℓ . Para que se proceda a separação das escalas deve-se ter $\ell/\ell' \ll 1$. Considera-se ainda uma escala de comprimento característico ℓ'' , com $\ell'' \gg \ell'$, onde nesta escala o meio como um todo é admitido homogêneo, permitindo uma descrição macroscópica.

Para a argamassa estudada neste trabalho, observa-se das imagens que $\ell' \sim 100\mu\text{m}$ (correspondendo ao comprimento de uma fissura) e que $\ell \sim 2\mu\text{m}$ (o diâmetro dos maiores poros da pasta de ligantes), o que conduz a uma razão de comprimentos característicos das escalas, $\ell/\ell' \sim 0.02$.

Também será visto no capítulo 2 que a porosidade da escala de fissuras ε' é menor que a porosidade ε da pasta de ligantes ($\varepsilon'=0.11$ e $\varepsilon=0.47$). Quanto aos comprimentos

característicos, definindo os limites de transição de meio heterogêneo para homogêneo, para a escala das fissuras e da pasta de ligantes, é assunto a ser discutido no capítulo 3.

No primeiro capítulo do presente trabalho, discorre-se sobre os modos operacionais concernentes à preparação de amostras da argamassa bem como sua observação através de microscopia eletrônica de varredura, como realizada por Yunes (1992). São apresentadas as micrografias da argamassa, procedendo-se uma análise puramente qualitativa acerca dos aspectos microestruturais de cada uma delas.

No segundo capítulo, as micrografias associadas à escala de fissuras e à escala da pasta de ligantes, são digitalizadas e binarizadas. A binarização define uma função de fase espaço poroso-matriz sólida (a função de fase será formalmente introduzida na seção 2.4.), onde são atribuídos valores numéricos (por exemplo, 1 e 0) para os pontos de cada fase, permitindo a quantificação de parâmetros estatísticos das imagens. Procede-se então, a determinação de alguns parâmetros estatísticos considerados relevantes para a microestrutura da argamassa: porosidade, função autocorrelação, função distribuição de volumes de poros e frequência de gargantas (estreitamentos) entre duas cavidades. A determinação desses parâmetros é realizada através de técnicas de análise de imagens. Entre várias técnicas disponíveis, este trabalho se apóia basicamente em duas operações da morfologia matemática: a erosão e a dilatação. A idéia básica da morfologia matemática consiste na comparação geométrica dos objetos de uma imagem com um objeto de forma conhecida, denominado elemento estruturante. Classicamente, o elemento estruturante utilizado é o círculo, o que implica na manipulação computacional de números reais, uma vez que se trabalha com a métrica euclidiana para a distância entre dois pontos. O presente trabalho se baseia na proposta bastante nova, devida a Chassery e Montanvert (1991) e Laurent et alii (1993), da utilização de métricas quasi-euclidianas e elementos estruturantes como octógonos, onde nesse caso se manipulam apenas valores inteiros. Ainda, classicamente, as operações de erosão e dilatação são efetuadas diretamente sobre a imagem de representação binária. Nós utilizamos a idéia de efetuar as operações sobre uma imagem transformada a partir da binária, chamada imagem de distância ao fundo. Esses conceitos são introduzidos no capítulo 2, e serão utilizados para a determinação da função distribuição de volumes de poros e a frequência (em número) de estreitamentos entre cavidades.

No capítulo 3, faz-se uma introdução aos conceitos envolvidos na teoria de fractais, procurando-se em seguida, caracterizar invariantes geométricos em mudança de escala para a imagem do complexo de fissuras e da pasta de ligantes.

No prosseguimento deste trabalho, procura-se obter uma representação geométrica do espaço poroso das imagens, que seja embasada nas características estatísticas medidas nas imagens digitalizadas originais. No conjunto de possibilidades disponíveis, estudam-se os chamados processos de reconstituição — ou de reconstrução, como definido por Adler (1992) — de estruturas porosas. Por reconstituição entende-se a criação de estruturas porosas artificiais, que conservem características estatísticas da imagem original como porosidade, autocorrelação e distribuição de volume de poros.

Segundo Adler (1992), materiais estatisticamente homogêneos podem ser representados pelos n primeiros momentos da função de fase. Certamente esta é a idéia mais geral quando se pensa na reconstituição de estruturas porosas: a criação de meios artificiais que reproduzam os n primeiros momentos da função de fase. Contudo, dada a dificuldade de execução desta idéia, em geral procura-se reproduzir apenas os dois primeiros da função de fase: a porosidade e a autocorrelação.

Como será visto, a reconstituição de certos tipos de imagens, permite a criação de estruturas bastante realísticas, cruas, se afastando da forte abstração inerente, por exemplo, aos modelos de redes de percolação de sítios e ligações. De fato, em geral essas redes não são correlacionadas espacialmente, e a conectividade é representada pelo número de coordenação Z , tomado constante para toda a rede, veja-se ilustração na figura I.1. Nos processos de reconstituição, quando se conservam, por exemplo, a porosidade e a autocorrelação do espaço poroso, a configuração geométrica gerada dispõe intrinsecamente uma conectividade entre os poros de forma a manter a porosidade e a autocorrelação.

A reconstituição se torna importante, uma vez que, com a hipótese de isotropia da imagem original bidimensional, permite obter estruturas tridimensionais, que melhor preservam as informações de conectividade.

No capítulo 4, estuda-se o processo de reconstituição como originalmente concebido por Joshi (1974), citado em Quiblier (1984) e Adler et alii (1990), visando reconstituições

bidimensionais. Quiblier (1984) e Adler et alii (1990) estenderam a idéia para reconstituições tridimensionais. Este método reconstitui uma imagem em um sistema que é visto como uma única escala, conservando a porosidade e a autocorrelação. O método será apresentado e implementado, procedendo-se às reconstituições das imagens da argamassa. Um resultado gratificante é encontrado para a imagem da pasta de ligantes: além de conservar a porosidade e a autocorrelação, é conservada juntamente a função distribuição de volumes de poros. No final do capítulo 4 são feitas algumas considerações acerca da simulação de processos de invasão de fluido não-molhante em meios reconstituídos através do método de Joshi.

No capítulo 5, introduz-se o conceito de sistemas multiescalas (SME), primeiramente concebido, ao nosso conhecimento, por Neimark (1989). Provavelmente, a idéia de SME surgiu da dificuldade existente nos sistemas monoescala de representar a estrutura de materiais com função distribuição de poros bastante larga, como é o caso da argamassa deste trabalho. Este modelo permite obter a representação de uma estrutura porosa, quando se dispõe de uma seqüência de imagens (escalas) do material, cada qual com um comprimento característico. Para tanto, em cada escala deve-se conhecer as frações de volumes de poros (que são observáveis para a dada escala), bem como as frações de cinza, que são as regiões não observáveis para a dada escala, que darão origem a uma nova escala (uma imagem obtida com um maior aumento microscópico) e assim sucessivamente. O modelo de SME de Neimark, será apresentado comentando-se algumas questões inerentes ao seu processo construtivo. Inspirado no modelo de Neimark, Daian (1992a, 1992b) propõe uma variação no processo construtivo do SME. O modelo proposto por Daian permite gerar um SME a partir apenas do conhecimento da função distribuição de volumes de poros. Um aspecto interessante neste modelo é que ele enxerga uma única imagem como desmembrada em várias escalas, cada escala correspondendo a uma classe de diâmetros de poros.

Os modelos de SME de Neimark e de Daian, são em essência processos de reconstituição de estruturas porosas. Os parâmetros estatísticos que alimentarão a geração do SME são as frações de volume de poros e de cinzas para cada escala no modelo de Neimark, e as frações de volume de poros no modelo de Daian.

Este trabalho se ocupa em estudar, com detalhes, o SME de Daian. O modelo, como concebido originalmente, será apresentado, procedendo-se a análise de suas especificidades.

A reconstituição da imagem da pasta de ligantes em SME de Daian, a partir das frações de volume por classes de poros, que foi obtida através das operações de erosão e dilatação, revela um resultado extremamente interessante: além de conservar a função distribuição de poros, é conservada a função covariograma (a função covariograma apresenta uma íntima relação com a autocorrelação, como será visto na seção 2.4.). Alguma tentativa é feita no sentido de se explicar esse comportamento.

Uma idéia que surge quando se considera o SME, é a de relacionar as frações de volume por escala com a função covariograma. Isto indica, em princípio, a possibilidade de reconstituição em SME, tendo-se como dados de entrada os valores de covariograma medidos em uma imagem original. Nesse sentido, Daian (1992c), propõe uma equação relacionando esses parâmetros. Fundamentada na construção do SME, a equação demonstra uma relação biunívoca entre a distribuição de poros e o covariograma. Contudo, a verificação dessa equação através da reconstituição de meios fictícios, revela dois fatores não considerados por Daian.

O presente trabalho propõe então uma nova equação, que quando da verificação (sobre meios fictícios) apresenta melhores resultados que a anterior.

No capítulo 5 é também proposta uma equação que visa obter o covariograma total da composição de duas imagens, onde se fez a separação de escalas, a partir do conhecimento dos covariogramas das duas imagens isoladamente.

Finalmente, no capítulo 6, simulam-se processos de invasão de fluido não-molhante (mercúrio) na imagem reconstituída em SME, tendo-se como dados de entrada as frações de volume por classe, para a imagem da pasta de ligantes, o que nos permite observar a influência da topologia (conectividade) do espaço poroso sobre o processo de invasão. Os resultados de volume de mercúrio invadido em função do diâmetro dos poros obtidos na simulação são cotejados aos derivados experimentalmente, mostrando uma concordância bastante boa.

CAPÍTULO 1

MICROESTRUTURA DE MATERIAIS POROSOS

1.1. Introdução

Um material poroso é um caso particular no universo dos materiais compostos. A especificidade advém do fato que uma de suas fases é formada de cavidades em vez de outro material (Haynes, 1973 citado em Quenard, 1989). Do ponto de vista deste trabalho de tese um material poroso é constituído de duas fases: o espaço poroso e a matriz sólida, esta última suposta indeformável e quimicamente inerte. Essas fases são complementares e aqui o interesse reside na descrição morfotopológica do espaço poroso, que para a grande maioria dos materiais se apresenta bastante complexo.

Na tentativa de descrição do espaço poroso vários parâmetros estatísticos são utilizáveis. Para este trabalho considera-se como parâmetros de interesse: a porosidade, a distribuição de volumes de poros, a função autocorrelação e a existência de um parâmetro denotando invariância na mudança de escala (a dimensão fractal).

Este capítulo se ocupa de uma breve citação de métodos de observação e caracterização de estruturas porosas com atenção ao que será utilizado neste trabalho: obtenção de micrografias através de microscopia eletrônica de varredura. No capítulo seguinte as imagens são digitalizadas e binarizadas visando a medição dos vários parâmetros estatísticos aplicando-se algumas técnicas de análise de imagens.

1.2. Métodos de Caracterização de Espaços Porosos

1.2.1. Porosimetria com Intrusão de Mercúrio

Este é um método que classicamente é baseado na suposição de que os poros são independentes uns dos outros (um conjunto de poros paralelos conectados individualmente à superfície do material). Em outras palavras é desconsiderada a conectividade do espaço poroso.

Em um ensaio desse tipo, sobre uma amostra inicialmente submetida a vácuo e acondicionada em uma câmara com um banho de mercúrio produz -se uma pressão p_{ij} , o que

ocasiona a intrusão de um volume de fluido Δv_i . A Δv_i atribui-se o preenchimento de uma classe de poros (supostos cilíndricos) de raio equivalente r_i que será dado por :

$$r_i = - \frac{2 \sigma \cos \alpha}{p_{li}} \quad (1.1.)$$

onde:

$\sigma = 0.480 \text{ N.m}^{-1}$, é a tensão superficial do mercúrio e

$\alpha = 140^\circ$, é o ângulo de contacto entre a interface do mercúrio e o sólido.

Como o volume Δv_i é medido diretamente pode-se através da equação anterior obter a distribuição de volumes de poros acumulada em função de seus raios.

Ora, a hipótese de conjunto de poros independentes, implica que os poros são preenchidos no sentido decrescente dos raios à medida que se aumenta a pressão, não importando suas posições no espaço poroso. Contudo, considere-se uma configuração como a esquematizada na figura 1.1, que representa uma cavidade de raio r_p e um estreitamento, uma garganta, de raio r_g ($r_g < r_p$), bastante freqüente na geometria de espaços porosos. Nesse caso a cavidade apenas se preencherá para uma pressão correspondente à da garganta: a penetração de mercúrio na cavidade é condicionada pela garganta.

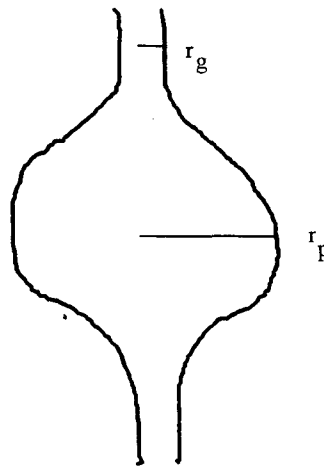


Figura 1.1. Uma configuração típica cavidade-garganta.

Dessa maneira, o volume de mercúrio penetrado será atribuído ao poro de raio equivalente r_g ocasionando uma sobreestimação do volume dos poros menores em detrimento dos maiores. De maneira geral, os ensaios de porosimetria com injeção de mercúrio trazem essa dificuldade na interpretação de seus resultados. De fato, Renault (1988), citado em Quenard (1989) trabalhando com modelos de rede mostra os problemas de interpretação inerentes à porosimetria com mercúrio.

1.2.2. Isotermas de Equilíbrio com Vapor de Água

As isotermas experimentais de vapor d'água conjugadas com modelos de adsorção física e condensação capilar fornecem informações da distribuição de volume para a região de poros de pequenos diâmetros (Daian, 1986; Fernandes, 1990; Philippi, 1991; Yunes, 1992; Philippi et alii 1994). Nesse caso, considera-se que a topologia não exerce influência sobre o processo de adsorção.

Vários trabalhos, dentre os quais citam-se Wall e Brown (1981), Mason (1988) obtêm informações topológicas, traduzidas em redes de percolação, com o uso da isoterma de dessorção.

Este trabalho utiliza os resultados obtidos por Philippi (1991), Yunes (1992) e Philippi et alii (1994) para descrever a função distribuição de volume de poros da argamassa na região de diâmetros inferiores a 1250\AA , seção 2.6.

1.2.3. Difusão em pequenos ângulos de Nêutrons (SANS) e raios-X (SAX) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

Estas técnicas de investigação direta são citadas em Quenard (1989). Elas apresentam larga utilização em vários campos científicos, contudo, a aplicação em materiais porosos é bastante recente e limitada. Segundo Quenard (1989), elas permitem que se explore poros bastante pequenos da ordem de dezenas de Ångström, mostrando assim sua importância. Embora venham apresentando resultados animadores, são técnicas que necessitam de uma infra-estrutura sofisticada.

1.2.4. Microscopia Conjugada com Técnicas de Análise de Imagens

Consiste em metodologia também recente no que toca à aplicação em materiais porosos permitindo caracterizar um grande número de parâmetros estruturais. Utilizou-se aqui, micrografias obtidas por microscopia eletrônica de varredura (MEV) (Yunes, 1992), com posterior digitalização e binarização para a análise das imagens, descritos a seguir.

1.3. Obtenção de Micrografias da Argamassa através de Microscopia Eletrônica de Varredura

As micrografias que serão apresentadas e utilizadas neste trabalho foram obtidas por Yunes (1992) junto à "Comisión Nacional de Energia Atómica", em Buenos Aires, Argentina. Descreve-se abaixo, de maneira sucinta, os processos associados à preparação das amostras bem como a observação microscópica propriamente dita.

1.3.1. Confeção das Amostras de Argamassa de Cal e Cimento

As amostras da argamassa foram confeccionadas utilizando uma proporção mássica de 8:2:1 (respectivamente areia, cal e cimento). A água adicionada representa de 20 a 25% da massa total (Fernandes, 1990, Yunes, 1992). A areia utilizada foi coletada em uma duna da praia da Pinheira (Palhoça/SC) praticamente isenta de materiais solúveis como demonstram testes feitos por Quadri (1988) e Fernandes (1990). Esta areia apresenta grãos cujos diâmetros variam de 100 a 300 μm com uma frequência de 70% para diâmetros entre 150 e 210 μm (Quadri, 1988). As amostras foram desmoldadas no quarto ou quinto dia após a confecção e deixadas a curar em condições ambientais por um período de aproximadamente 60 dias. Este período de cura visa a obtenção de amostras já carbonatadas, o que é testado com uma solução de fenolftaleína como indicador ácido-base (Fernandes, 1990; Yunes, 1992).

As amostras assim obtidas apresentam uma porosidade de $0.31 \pm 0.03 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3$ em testes de Fernandes (1990) e de $0.307 \pm 0.005 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3$ em ensaios realizados pelo Eng. Aldomar Pedrini e notificados em Pedrini et alii (1991). A densidade aparente é de $1.73 \pm 0.05 \text{ g} / \text{cm}^3$ (Fernandes, 1990), e de $1.71 \pm 0.05 \text{ g} / \text{cm}^3$ em ensaios de Yunes (1992).

1.3.2. Preparação das Amostras para Microscopia e Modo de Operação do MEV

A preparação das amostras pode ser dividida em três etapas: impregnação do espaço poroso com uma resina epóxi (XGY da Ciba Giegy, diluída em álcool etílico); desbaste e polimento da superfície de observação e evaporação da resina impregnada. A impregnação com resina visa proporcionar resistência mecânica à amostra de modo a atenuar rearranjos estruturais ou mesmo desestruturação quando do desbaste e polimento. A amostra previamente seca é submetida à vácuo antes e depois da impregnação. Deixa-se a resina curar por um período de 24 horas.

Após a cura, procede-se o polimento grosso utilizando lixa 600 de carbeto de silício. O objetivo é a retirada do excesso de resina (não contida no espaço poroso) e trabalha-se com bancada politriz em alta rotação tendo água como fluido refrigerante. O polimento fino é realizado com o uso de pós de diamante de várias granulometrias diluídos em um lubrificante e aplicados embebidos em um pano macio. A sequência de diâmetros de grãos 15:9:6:3:1:0.25 μ m foi a que apresentou melhores resultados. Uma fonte de ultra-som é utilizada entre cada dois processos consecutivos de modo a eliminar os cristais de diamante que restaram aderidos do polimento anterior e que contaminariam o processo seguinte, danificando a superfície da amostra.

Após o polimento, a resina é evaporada a 350°C, no interior de um tubo de quartzo (pressão de 10 μ m de Hg). A evaporação da resina deve se dar em ausência de oxigênio de modo a evitar reações de combustão, com conseqüente carbonização da superfície. Ainda que feita numa temperatura elevada, a evaporação da resina é necessária para possibilitar a formação de contraste para as micrografias.

O MEV (um Philips PSEM 500) é operado nos modos emissivo e refrativo. No modo emissivo, são detectados apenas os elétrons secundários emitidos pela superfície, enquanto que no refrativo são detectados os elétrons retrodifundidos. Yunes (1992) conseguiu as melhores micrografias trabalhando com o modo emissivo, apresentadas a seguir.

1.4. Micrografias da Argamassa. Observações Qualitativas

Um grande número de micrografias (cerca de quarenta) foi obtido por Yunes (1992), para aumentos microscópicos variando de 25X a 12500X. Foram utilizadas quatro amostras diferentes (submetidas ao processo de evaporação da resina), sendo analisadas regiões distintas dessas amostras. Em função da complexidade dos processos de preparação das amostras e de observação microscópica, várias dessas micrografias não apresentaram boa intensidade luminosa e bom contraste entre o espaço poroso e a matriz sólida. Dessa forma, para cada aumento microscópico, foi selecionada a melhor micrografia no sentido de atender os requisitos de luminosidade e contraste, bem como de planicidade. Supõe-se aqui, que a micrografia escolhida, para cada aumento microscópico, seja representativa do espectro poroso por ela coberto.

Nas figuras 1.2 a 1.8 são mostradas as micrografias da estrutura da argamassa de cal e cimento com aumentos variando de 25X a 12500X, obtidas por Yunes (1992) da maneira descrita acima.

Na micrografia de uma seção polida com aumento de 25X, figura 1.2, podem ser observados os grãos de areia com diâmetros característicos compreendidos entre 100 e 300 μm bem como cavidades (regiões mais escuras) de dimensões comparáveis à dos grãos. Essas cavidades representam possíveis inclusões de ar ou zonas nas quais ocorreu remoção dos grãos devido o processo de desbaste e polimento. Ainda, para esta escala de observação, a pasta de ligantes aparece como uma massa homogênea envolvendo os grãos de areia.

O aspecto significativo que aparece na micrografia associada ao aumento de 200X, figura 1.3, diz respeito ao que se pode chamar de uma rede de fissuras em torno dos grãos e no seio da pasta de ligantes com uma largura característica da fissura em torno de 2 a 4 μm . A gênese dessas fissuras, sem se tentar um estudo compreensivo do processo de formação, é aqui atribuída ao próprio processo de cura da argamassa e às tensões térmicas. De fato, o aquecimento das amostras para a evaporação da resina epóxi, seção 1.3.2., deve contribuir na formação das fissuras. Contudo, fissuras podem ser observadas tanto no contorno dos grãos como no interior da pasta de ligantes, para amostras fraturadas (não polidas), veja-se figura 1.4, que foram conservadas à temperatura ambiente para o processo de cura e secadas a 75°C. Estas

amostras fraturadas não foram impregnadas com resina e portanto não sofreram o processo de evaporação à 350°C.

Outras evidências experimentais da ocorrência das fissuras podem ser consideradas. Com a utilização de difração de raios-X, Paulon e Monteiro (1991), observaram uma zona de transição entre uma pasta de cimento e os agregados, que apresenta uma baixa resistência mecânica. Knab et alli (1984) e Jennings (1988) observaram a presença de fissuras em materiais a base de ligantes hidráulicos através de métodos de investigação direta. Fernandes (1990) e Pedrini et alli (1990) em experimentos de porosimetria com intrusão de mercúrio em amostras da argamassa secadas a 75°C encontraram uma pressão de invasão crítica em torno de 0.7 Mpa (onde ocorre um súbito preenchimento do espaço poroso) o que corresponde a um diâmetro de garganta em torno de 2 a 4 μ m, denotando a pressão de invasão do mercúrio na rede de fissuras. Citam-se também os trabalhos de Saliba (1990) e Souza (1993) que utilizaram modelos de redes de fissuras para simular a transferência de umidade em materiais à base de ligantes hidráulicos obtendo resultados que apresentam boa concordância com os dados experimentais. Do ponto de vista físico, as fissuras constituem pontes para a transferência de líquido e vapor no seio do material ocasionando um aumento significativo nos valores de condutividade hidráulica sobretudo para valores elevados de conteúdo de umidade.

A micrografia com aumento de 800X, figura 1.5, evidencia melhor a rede de fissuras e podem ser notadas partículas de alumina com diâmetro variando entre 10 e 20 μ m.

Nos aumentos de 3200X, 6400X e 12500X — figuras 1.6, 1.7, 1.8, respectivamente — pode-se observar a microestrutura da pasta de ligantes. Evidencia-se um universo de pequenos capilares, de diâmetros inferiores a 2000Å, envolto por capilares maiores. Esses pequenos poros são responsáveis pelas propriedades higroscópicas da argamassa.

Pode-se ainda dizer que as micrografias de 3200X, 6400X, e 12500X apresentam um aspecto geométrico bastante similar, a ponto de provocar confusão acerca de quem é quem aos olhos do observador. Isto é o que se chama autosimilaridade estatística, ou invariância por dilatação, característica de muitos objetos fractais, assunto que será discutido no capítulo 3.

Feitas essas considerações parte-se para a quantificação dos vários parâmetros estatísticos citados anteriormente, o que será efetivado nos dois capítulos seguintes.

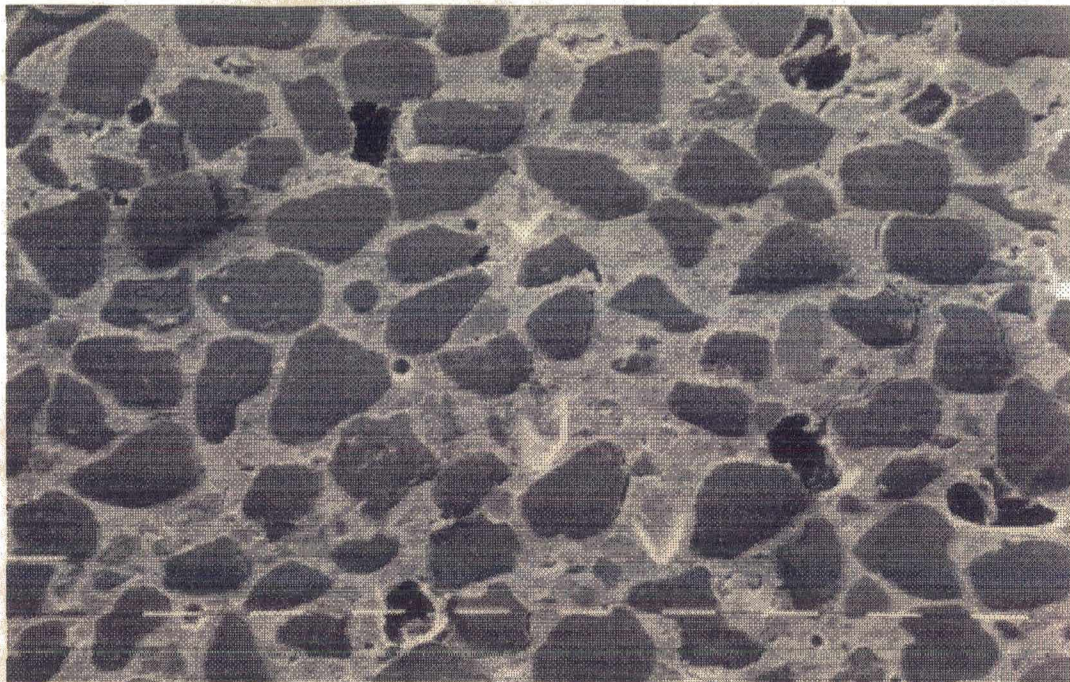


Figura 1.2. Micrografia de superfície polida de amostra da argamassa obtida com MEV. Aumento de 25X. Cada traço da escala equivale a 100 μm .

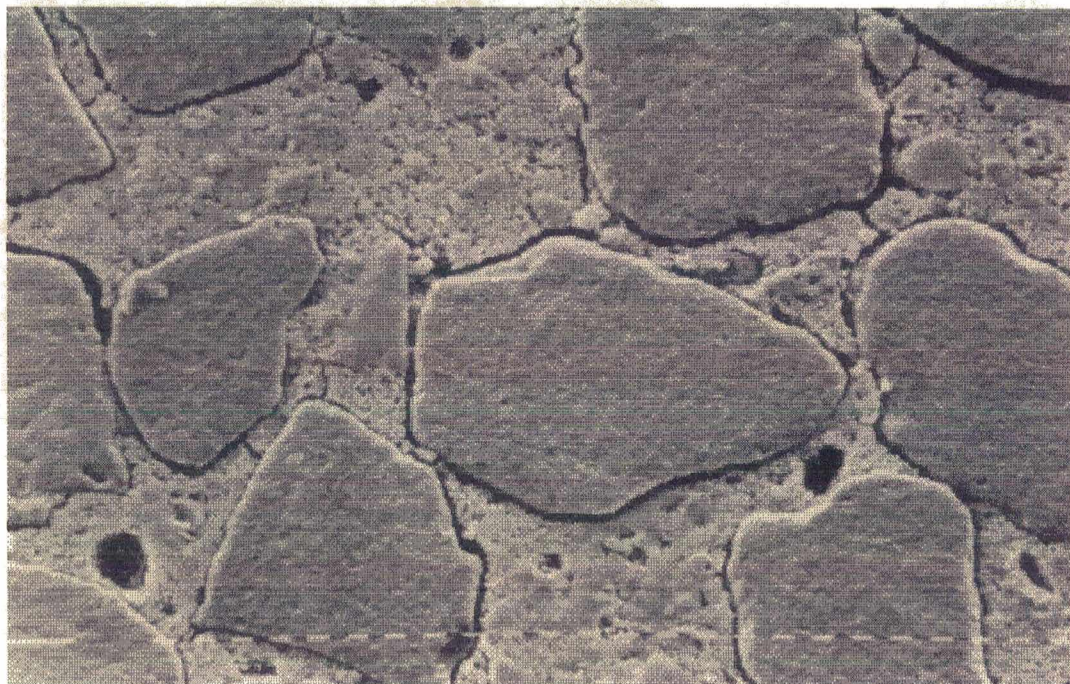


Figura 1.3. Micrografia de superfície polida de amostra da argamassa obtida com MEV. Aumento de 200X. Observar a rede de fissuras. Cada traço da escala equivale a 10 μm .



Figura 1.4. Micrografia de amostra fraturada da argamassa obtida com MEV. Aumento de 200X. Cada traço equivale a 10 μm .

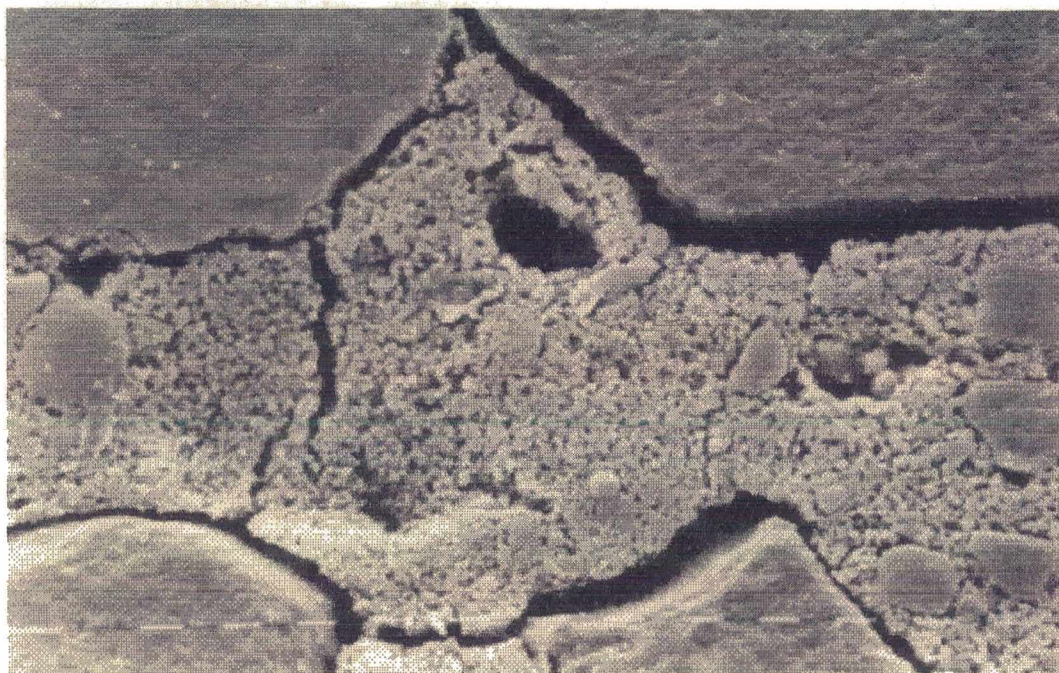


Figura 1.5. Micrografia de superfície polida de amostra da argamassa obtida com MEV. Aumento de 800X. Cada traço da escala equivale a 10 μm .

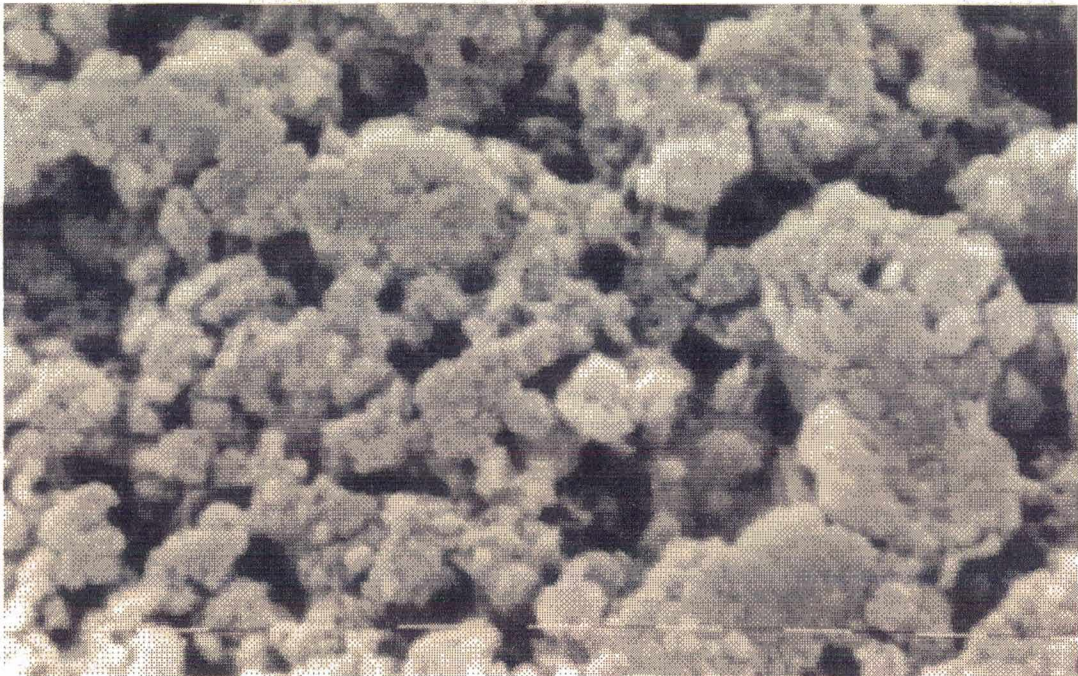


Figura 1.6. Micrografia da pasta de ligantes da argamassa. Aumento de 3200X. Cada traço da escala equivale a 1 μm .

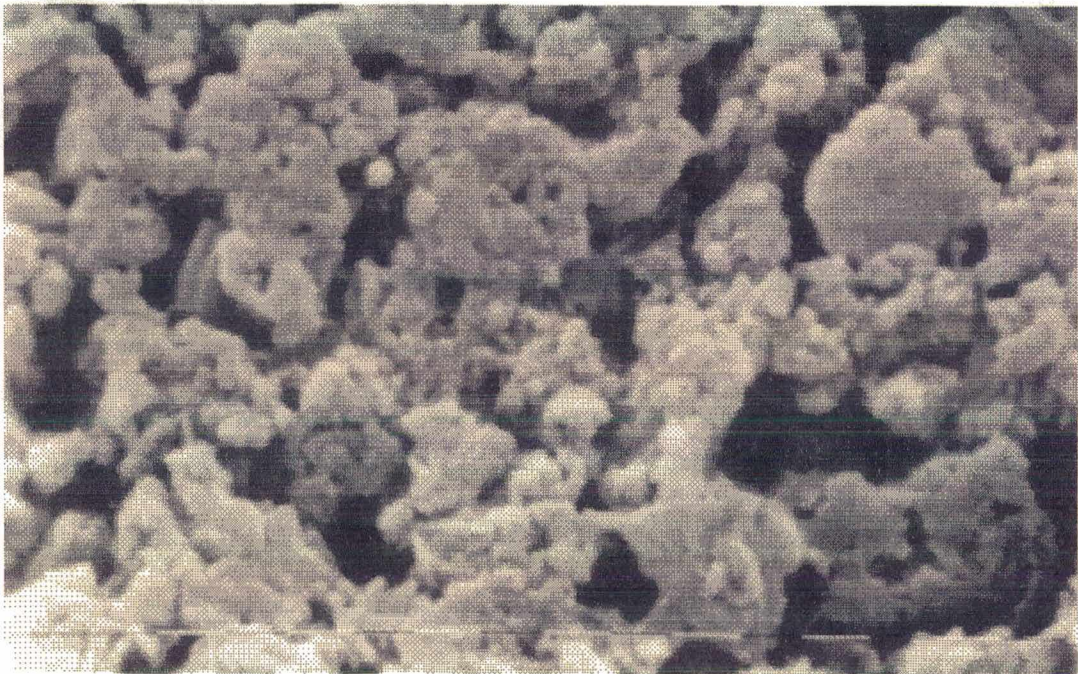


Figura 1.7. Micrografia da pasta de ligantes da argamassa. Aumento de 6400X. Cada traço da escala equivale a 1 μm .

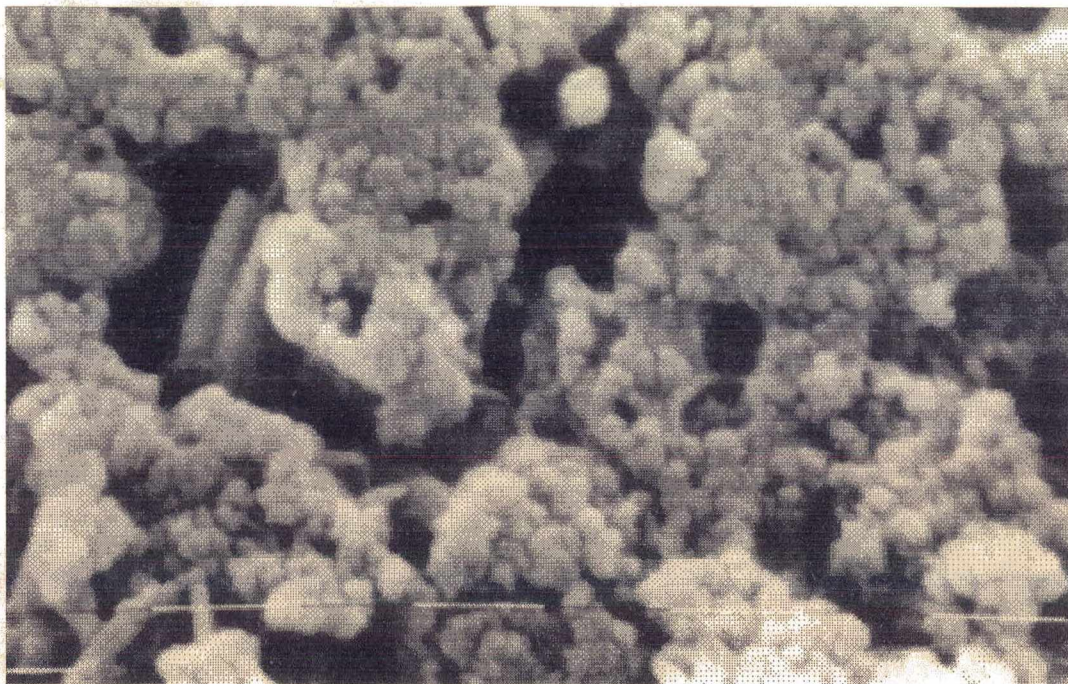


Figura 1.8. Micrografia da pasta de ligantes da argamassa. Aumento de 12500X. Cada traço da escala equivale a 1 μm .

CAPÍTULO 2

CARACTERIZAÇÃO DA ESTRUTURA POROSA DE MATERIAIS ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE ANÁLISE DE IMAGENS

2.1. Introdução

Uma vez obtidas as micrografias de seções polidas da argamassa, deseja-se agora quantificar vários parâmetros que descrevem a microestrutura: porosidade, autocorrelação, distribuição acumulada de volume de poros, dimensão fractal. Como dito anteriormente, esses parâmetros são importantes, pois permitem estabelecer correlações com os processos físicos de transferência de calor e umidade em materiais porosos. São também a base de dados de entrada nos processos de reconstituição de espaços porosos artificiais, assunto a ser discutido mais a frente.

Para a requerida quantificação de parâmetros, torna-se necessário discretizar as micrografias, atribuindo valores numéricos para cada célula elementar. No caso deste trabalho, as micrografias são digitalizadas em microcomputador com o auxílio de um "scanner", fornecendo um arquivo manipulável com informações para cada pixel (a célula elementar) em 256 tons de cinza, que é posteriormente binarizado. A binarização define uma função de fase matriz sólida - espaço poroso permitindo a quantificação dos parâmetros.

Neste capítulo procede-se a definição e obtenção da função autocorrelação (para as imagens da argamassa associadas aos aumentos de 200X e 3200X), da distribuição acumulada de volumes de poros da argamassa (descrevendo o espectro poroso de 200Å a aproximadamente 20 μ m) e da frequência de gargantas (estreitamento entre duas cavidades) em número para a imagem da pasta de ligantes. A caracterização da dimensão fractal é assunto para o capítulo seguinte.

2.2. Imagens Digitalizadas

A imagem da microestrutura de um material poroso contida em uma micrografia, como as apresentadas no capítulo anterior, é considerada ser de natureza analógica correspondendo a uma distribuição de intensidades luminosas em um domínio de \mathbf{R}^2 , representada por uma função f . A representação numérica de uma tal imagem consiste em construir a partir de f uma outra função f_A definida em um domínio desmembrado de \mathbf{R}^2 onde os elementos de representação numérica são manipuláveis por computador (Chassery e Montanvert, 1991).

Chassery e Montanvert (1991) definem f_A a partir de f como:

$$f_A(P) = \frac{1}{S_P} \iint_{V_P} f(x,y) dx dy \quad (2.1.)$$

Nesta equação, P pertence ao conjunto desmembrado de \mathbf{R}^2 (uma célula) e V_P designa o domínio de superfície (a célula) associado ao ponto P onde S_P é a área correspondente a esse domínio. O que realmente se faz é uma discretização da imagem, digamos por uma malha quadrada, onde cada célula elementar da malha representa o domínio V_P . Procede-se então à numerização dada pela equação (2.1.), que é definida por um captor que integra em um ponto P as informações de intensidade luminosa na vizinhança de P .

No caso deste trabalho, o captor utilizado sobre as micrografias é um "scanner" de marca comercial HP ScanJet IIC, que digitaliza as imagens em 256 tons de cinza. Nesse caso, o domínio V_P é traduzido por pixels, podendo-se variar o número de pixels por unidade de área.

Para um estudo detalhado sobre discretização de imagens analógicas pode-se recorrer a Chassery e Montanvert (1991).

2.3. Binarização

As imagens contidas nas micrografias são digitalizadas em computador através do "scanner" fornecendo um arquivo descritivo em 256 tons de cinza, com valores numéricos codificados de 0 (correspondendo ao preto) a 255 (o branco), sendo os valores intermediários os níveis de cinza.

Torna-se interessante, do ponto de vista de simplicidade de manipulação dos dados, operar uma transformação global sobre a imagem em tons de cinza de forma a se obter uma função de fase que define o espaço poroso e a matriz sólida. Tem-se então um modo binário de representação da imagem onde, por exemplo, o espaço poroso assume o valor 0 e a matriz sólida o valor 255. O processo de binarização consiste em se definir por um determinado método, um limite de separação na escala de níveis de cinza, onde abaixo desse limite assume-se o valor 0 e acima o valor 255.

Segundo Moschetto (1991) os métodos de binarização podem ser classificados em dois grupos:

- Os métodos que utilizam o histograma de níveis de cinza e
- aqueles que utilizam informações do contorno dos objetos constituintes da imagem.

As imagens deste trabalho, em geral, foram digitalizadas constituindo um arquivo de formato TIF em 256 tons de cinza que foram binarizadas — com o auxílio de um software comercial que utiliza um método baseado no histograma de níveis de cinza — fornecendo um arquivo binário de formato BMP, manipulável nos códigos contruídos neste trabalho. Deve ser enfatizado que as medições que são efetuadas em uma imagem são fortemente dependentes da qualidade da binarização, que para a maioria das imagens é tarefa bastante difícil. Utilizou-se as imagens da argamassa de aumentos de 200X e 3200X, figuras 1.3 e 1.6 respectivamente, que permitem descrever a microestrutura da argamassa para poros de até 1250Å de diâmetro. As micrografias com aumentos de 6400X e 12500X não foram utilizadas visando as medições de interesse (no espectro poroso de diâmetros inferiores a 1250Å) uma vez que elas apresentam efeitos espaciais de profundidade (afastamento da bidimensionalidade) bastante acentuados. Essas imagens, *a priori*, nos permitem apenas uma análise qualitativa, o que foi feito na seção 1.4.

Na figura 2.1 apresenta-se a imagem digitalizada correspondente à micrografia de aumento de 200X. Nesta imagem, definiu-se através de um processo manual sobre a imagem em tons de cinza na tela do computador, três fases: a fase preta corresponde ao espaço poroso (observável

para esta escala); a fase branca denota os grãos de areia e a cinza é posta para representar a pasta de ligantes. Esta fase cinza é representada pela imagem digitalizada associada à micrografia de aumento de 3200X, que será apresentada logo abaixo. No que toca à realização de medições nessa escala de 200X a fase cinza se comporta como branca (sólido) constituindo juntamente com a fase preta uma imagem binária. A porosidade, isto é, a fração de células pretas em relação ao total para a escala de 200X apresenta o valor 0.11; a fração de cinza é de 0.29.

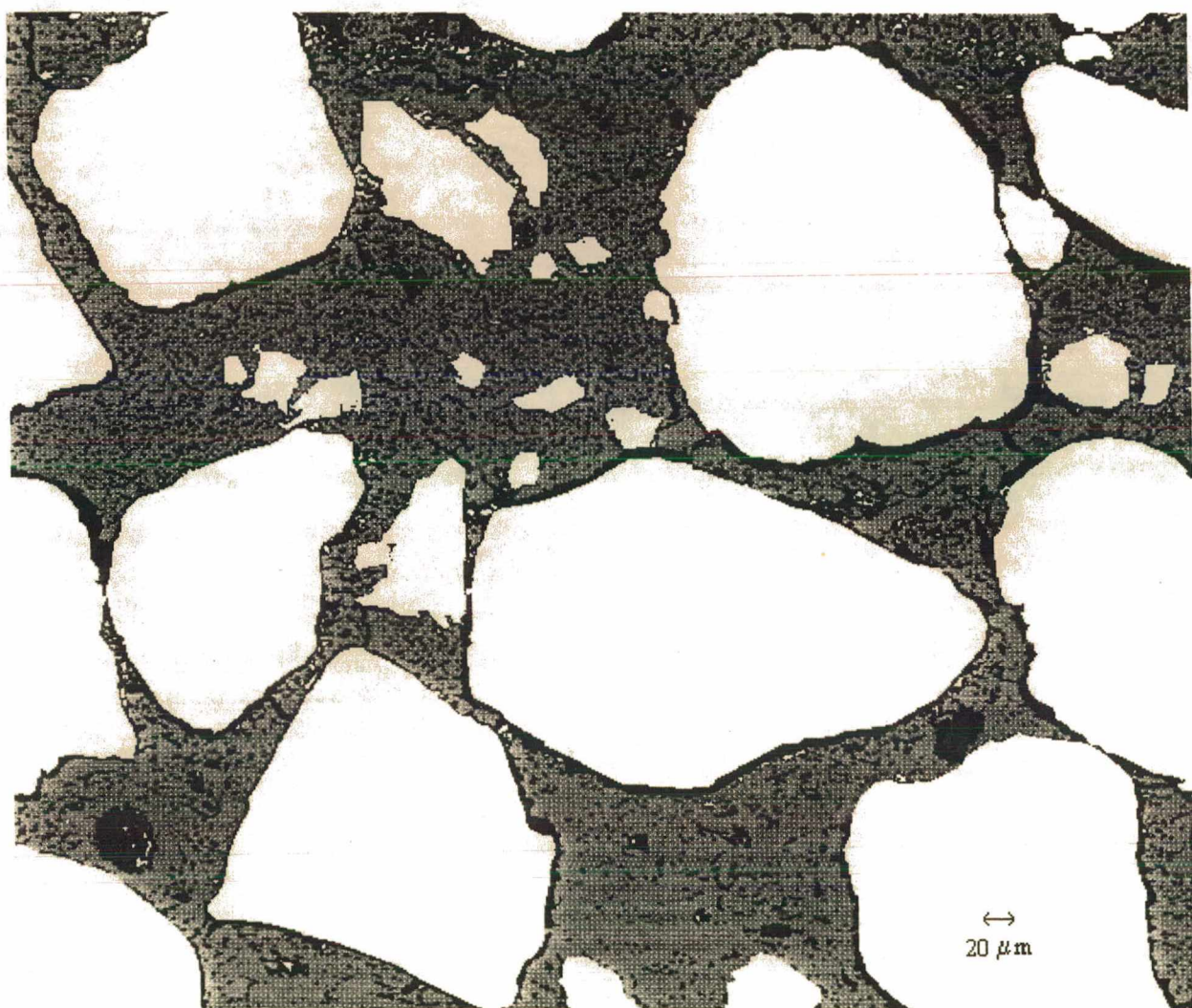


Figura 2.1. A imagem digitalizada associada à micrografia de aumento 200X. A fase preta corresponde ao espaço poroso e a branca denota os grãos de areia; a fase cinza representa a pasta de ligantes a ser observada na imagem de 3200X. O pixel mede 12500Å.

Na figura 2.2 tem-se a imagem binária que representa a microestrutura da pasta de ligantes com aumento de 3200X. Novamente a fase preta designa o espaço poroso e a branca matriz sólida para esta escala. A porosidade obtida é de 0.47.

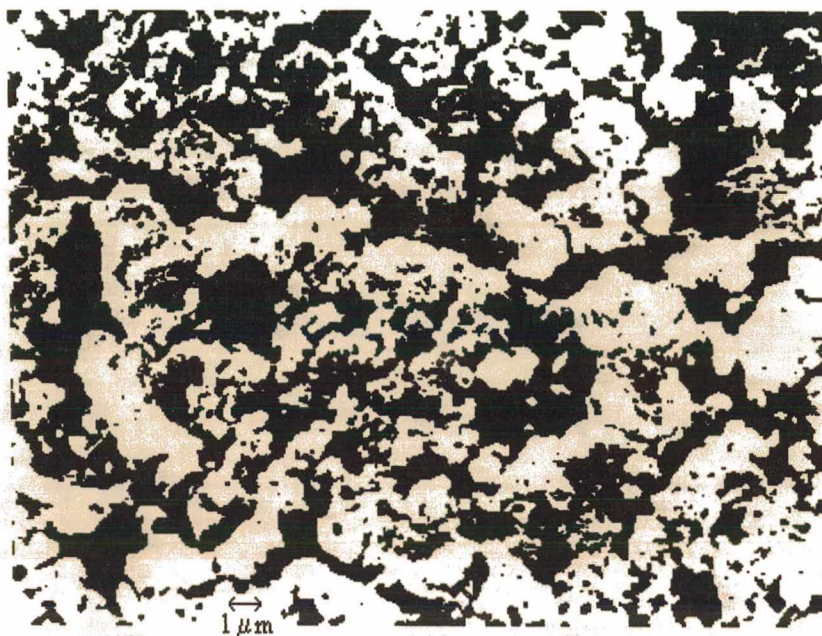


Figura 2.2. A imagem digitalizada binária correspondente à micrografia de aumento 3200X. A fase preta corresponde ao espaço poroso. O pixel mede 625Å.

Comenta-se aqui que a binarização da micrografia de aumento 3200X é bastante complicada: ela já apresenta efeitos de profundidade bem como fortes diferenças de contraste em certas regiões da imagem para a mesma fase (principalmente na matriz sólida). A diferença de contraste para a mesma fase é oriunda, provavelmente, do fato de a superfície da amostra analisada no microscópio não ser perfeitamente plana. Isto provoca ângulos diferentes de reflexão do feixe de elétrons, o que ocasiona a diferença de contraste. Ressalta-se, também, que o software utilizado se baseia no método menos elaborado (em relação ao de detecção do contorno dos objetos) de corte em um determinado ponto do histograma de níveis de cinza.

Efetuuou-se o corte em dado nível de cinza de forma a satisfazer a porosidade da dada escala que composta com o restante do espectro poroso recuperava o valor de porosidade total da argamassa obtida experimentalmente — que é de aproximadamente 0.31 (Fernandes, 1990; Pedrini et alii, 1992; Yunes, 1992). A imagem binarizada obtida, figura 2.2, apresenta uma

definição do espaço poroso bastante parecida com a imagem associada, figura 1.6, contudo, deve-se considerar que para esta micrografia esta definição é por vezes subjetiva.

Ressalta-se que essa binarização mesmo satisfazendo a porosidade, que é uma informação global da imagem, pode ocasionar erros na caracterização do ponto de vista local dos objetos.

2.4. A Função Autocorrelação

Dada uma imagem, define-se uma função de fase:

$$P(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence ao espaço poroso} \\ 0, & \text{se não} \end{cases} \quad (2.2.)$$

onde \mathbf{x} denota um vetor de posição no plano da imagem com relação a uma origem arbitrária. No caso de imagens discretas, como as utilizadas neste trabalho, o vetor \mathbf{x} corresponde às coordenadas (x_1, x_2) onde x_1 e x_2 são inteiros e múltiplos da unidade de medida, o pixel. A porosidade para a dada imagem será:

$$\varepsilon = \langle P(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.3.)$$

onde o símbolo $\langle \rangle$ denota a média estatística para o domínio de imagem em consideração.

A função autocorrelação é escrita como (Quiblier, 1984; Adler et alii, 1990):

$$R_{pp}(\mathbf{u}) = \frac{\langle (P(\mathbf{x}) - \varepsilon)(P(\mathbf{x} + \mathbf{u}) - \varepsilon) \rangle}{\langle (P(\mathbf{x}) - \varepsilon)^2 \rangle} \quad (2.4.)$$

definida para cada deslocamento arbitrário \mathbf{u} no plano da imagem. Com a hipótese de meio isotrópico a autocorrelação dependerá apenas da norma u do vetor \mathbf{u} e dessa forma:

$$R_{pp}(u) = \frac{\langle (P(x_1, x_2)P(x_1 + u, x_2)) \rangle - \varepsilon^2}{\varepsilon - \varepsilon^2} \quad (2.5.)$$

A equação anterior fornece uma maneira para a determinação da função autocorrelação: a imagem é deslocada sobre ela mesma na direção x_1 (ou x_2) em múltiplos do pixel e mede-se a frequência de resultados associados à intersecção de duas células pretas (espaço poroso). Este procedimento dá o chamado covariograma (Quiblier, 1984):

$$C_{pp}(u) = \langle P(x_1, x_2)P(x_1 + u, x_2) \rangle \quad (2.6.)$$

Assim, a autocorrelação $R_{pp}(u)$ é obtida algebricamente a partir da medição do covariograma $C_{pp}(u)$. Operacionalmente o que de fato é feito, é a divisão de uma imagem S em duas metades S_1 e S_2 (Adler et alli, 1990), onde :

$$S = S_1 \cup S_2 \text{ e } S_1 \cap S_2 = \emptyset \quad (2.7.)$$

Desloca-se, então, a metade S_1 na direção x_1 sobre S para a obtenção do covariograma. Pode-se ter uma idéia do grau de homogeneidade da amostra comparando-se a porosidade da metade da imagem S_1 com a da imagem total S . Deve ser notado que a porosidade de S_1 é simplesmente o covariograma para deslocamento nulo, $C_{pp}(u = 0)$.

O covariograma nos dá a probabilidade de que duas células elementares separadas por uma distância u pertençam ao espaço poroso. Os valores estatísticos do covariograma variam da porosidade ε para deslocamento nulo a ε^2 para deslocamentos grandes, enquanto a autocorrelação varia de 1 a 0. De fato, para deslocamentos grandes o meio se torna não-correlacionado e a probabilidade de se encontrar duas células do espaço poroso será $\varepsilon \cdot \varepsilon = \varepsilon^2$.

Na literatura, a terminologia aqui utilizada — seguindo Quiblier (1984) —, para autocorrelação e covariograma muitas vezes se confundem, o que nos parece natural, uma vez que a autocorrelação é simplesmente obtida do covariograma pela operação algébrica da equação (2.5.), constituindo uma espécie de normalização. Ainda, aqui se refere à

autocorrelação para designar a correlação de uma fase com ela mesma (no exposto acima a do espaço poroso); a correlação de uma fase com a outra é dita correlação cruzada, veja-se o capítulo 5.

Neste trabalho, quando não houver prejuízo de interpretação referir-se-á indistintamente ao termo correlação, muito embora será utilizado mais freqüentemente as medições de covariograma .

Nas figuras 2.3 e 2.4 são mostrados os resultados de medição dos covariogramas (para o espaço poroso) associados às imagens digitalizadas de aumentos 200X e 3200X, respectivamente. Os covariogramas das figuras 2.3 e 2.4 foram obtidos cortando-se as imagens na direção longitudinal do plano do papel em que estão apresentadas (figuras 2.1 e 2.2), deslocando-se a metade da imagem na direção transversal — chamada de x daqui em diante. O covariograma será utilizado quando da determinação da dimensão fractal e como variável de entrada nos processos de reconstituição de estruturas porosas.

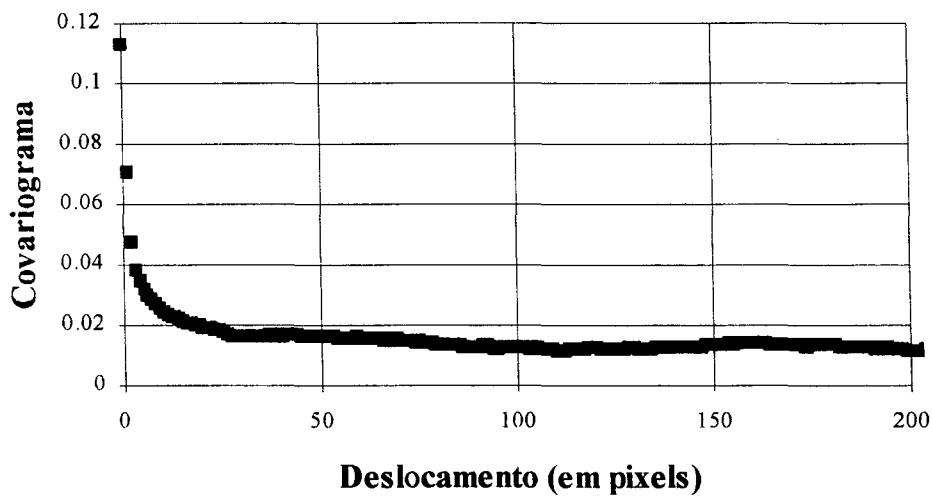


Figura 2.3. A função covariograma para a imagem de aumento 200X. O pixel equivale a 12500Å. O covariograma para deslocamento nulo apresenta o valor de 0.1129.

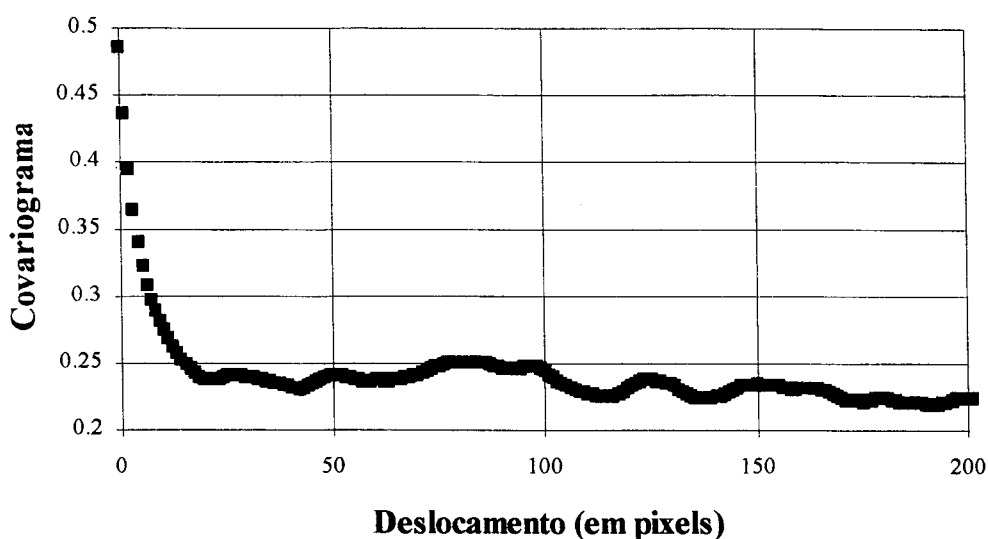


Figura 2.4. A função covariograma para a imagem de aumento 3200X. O pixel equivale a 625Å. O covariograma para deslocamento nulo apresenta o valor de 0.4863

Com a finalidade de se observar a homogeneidade e isotropia estatística das imagens associadas ao aumento de 200X e 3200X, os covariogramas foram também medidos, sempre na chamada direção x, porém com as imagens rotacionadas de 90°, 180° e 270°, a partir das posições que se encontram apresentadas nas figuras 2.1 e 2.2. Para a imagem de 200X, que possui um tamanho de 618x527 pixels, tomou-se uma parte quadrada de 512x512 pixels procedendo-se às rotações. A imagem de aumento de 3200X foi rotacionada a partir de seu tamanho original que é de 405x308 pixels.

Nas figuras 2.5 e 2.6 são apresentados, para as imagens de aumentos de 200X e 3200X, respectivamente, os resultados de covariograma obtidos considerando-se as rotações bem como os valores médios para as quatro rotações.

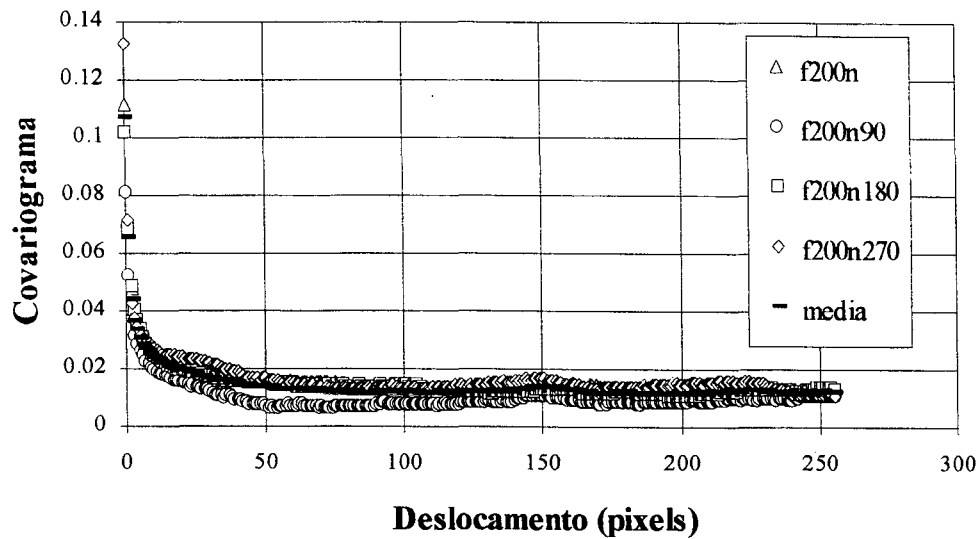


Figura 2.5. Os covariogramas para as quatro rotações para a imagem de aumento de 200X.

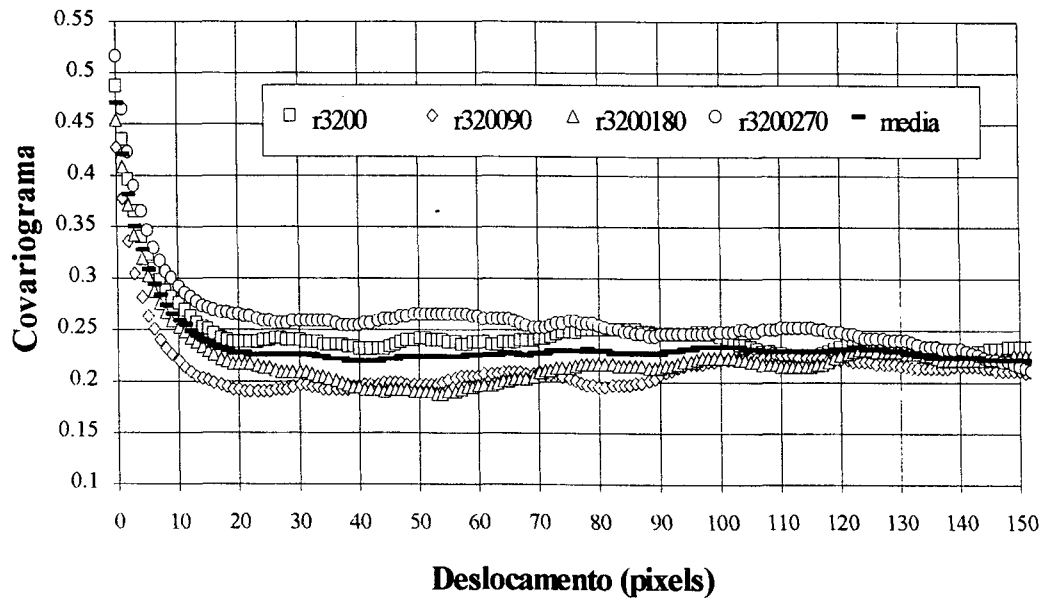


Figura 2.6. Os covariogramas para as quatro rotações para a imagem de aumento de 3200X.

A despeito das variações estatísticas de covariograma para cada deslocamento, considerando-se as quatro rotações, este trabalho assume a hipótese de isotropia estatística para as imagens de 200X e 3200X. Além disso, pode ser observado para as duas imagens que o valores médios de covariograma (para as quatro rotações) concorda bastante bem com aqueles resultados obtidos apenas considerando a direção x nas imagens das figuras 2.1e 2.2. Desta

forma, de um modo geral, nas aplicações que fazem uso do covariograma neste trabalho, nós utilizaremos os resultados apresentados nas figuras 2.3 e 2.4.

2.5. Técnicas de Análise de Imagens

2.5.1. Morfologia Matemática

A morfologia matemática, que é fundamentada na teoria dos conjuntos, permite uma descrição da forma dos objetos de uma imagem. A idéia de base consiste em comparar os objetos da imagem com um objeto de forma conhecida chamado elemento estruturante (Coster e Chermant, 1989; Moschetto, 1991).

As operações elementares da morfologia matemática são a erosão e a dilatação, descritas a seguir, e suas combinações: a operação de abertura (erosão seguida de dilatação) e o fechamento (dilatação seguida de erosão). Utilizam-se operações de abertura sucessivas, com tamanho do elemento estruturante crescente para a obtenção da distribuição acumulada de volumes de poros em uma imagem. Com operações de erosão com um elemento estruturante de raio crescente sobre uma mesma imagem original pode-se obter a distribuição acumulada (em número) de gargantas (estreitamento entre duas cavidades).

2.5.2. Operações de Erosão e Dilatação

Seja um objeto A e um elemento estruturante B_x , como por exemplo um círculo, que é classicamente utilizado. Define-se o erodido de A por B_x como sendo o conjunto dos pontos x nos quais o centro geométrico de B_x implantado resulta em B_x contido em A : $\{x / B_x \subset A\}$. Na figura 2.7, está ilustrada a operação de erosão de um objeto genérico A por um círculo como elemento estruturante.

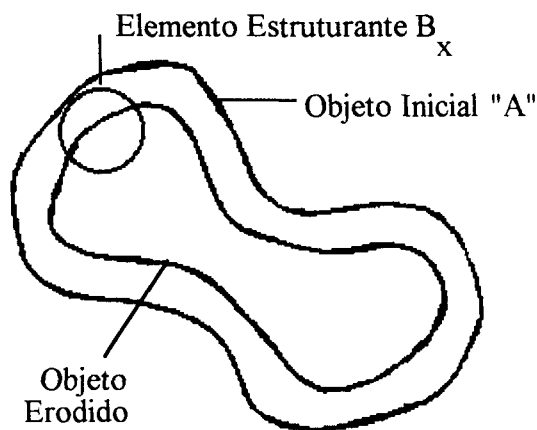


Figura 2.7. Ilustração da operação de erosão de um objeto por um círculo como elemento estruturante.

O dilatado de A por B_x , veja-se ilustração na figura 2.8, consiste do conjunto de pontos x tais que o centro do elemento estruturante aí implantado tem uma intersecção não nula com A : $\{x / B_x \cap A \neq \emptyset\}$.

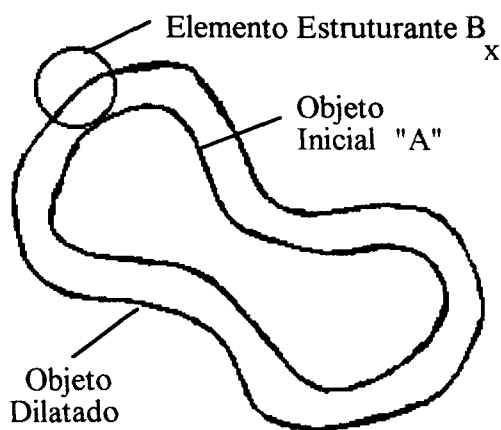


Figura 2.8. Ilustração da operação de dilatação

Como dito, classicamente as operações de erosão e dilatação utilizam o círculo como elemento estruturante, contudo isto implica na manipulação computacional de números reais — uma vez que se baseia no conceito de distância euclidiana entre dois pontos — o que conduz a um grande esforço computacional (Laurent et alii, 1993). Além disso, as operações são

efetuadas diretamente sobre a imagem de representação binária, o que implica na realização de um grande número de testes.

Chassery e Montanvert (1991) e Laurent et alii (1993) realizam as operações de erosão e dilatação fazendo uso de métricas quasi-euclidianas, ditas de chanfro, envolvendo as chamadas distâncias de chanfro, e os elementos estruturantes que são as máscaras de chanfro. As máscaras de chanfro são octógonos para a métrica dita d_{3-4} , que se aproximam bem de um círculo e permitem uma representação apenas com números inteiros. Também, no lugar de se realizar as operações diretamente sobre a imagem de representação binária define-se uma imagem transformada dita imagem de distância ao fundo que diminui consideravelmente o número de testes a se realizar.

A seguir, descreve-se os conceitos acima citados e procede-se a sua utilização.

2.5.3. Aproximação Discreta da Distância Euclidiana

Quando se utilizam imagens digitalizadas, que constituem um espaço discreto \mathbf{Z}^2 , faz-se necessário a introdução da noção de distância discreta para a descrição dos objetos. As primeiras métricas discretas que surgiram foram a d_4 e a d_8 . As distâncias para estas métricas, entre dois pontos $P(x_p, y_p)$ e $Q(x_q, y_q)$ do plano da imagem são definidas por (Chassery e Montanvert, 1991):

$$\begin{aligned} d_4(P, Q) &= |x_p - x_q| + |y_p - y_q| \\ d_8(P, Q) &= \text{máximo}(|x_p - x_q|, |y_p - y_q|) \end{aligned} \quad (2.8.)$$

Contudo, os valores de distância associados a essas métricas afastam-se bastante daqueles fornecidos pela distância euclidiana d_E , dada por:

$$d_E(P, Q) = \sqrt{(x_p - x_q)^2 + (y_p - y_q)^2} \quad (2.9.)$$

Claramente, pode-se trabalhar com a métrica euclidiana, porém isto conduz a tempos de execução mais longos e a necessidade de armazenamento de valores reais (Moschetto, 1991; Laurent et alii, 1993). Procura-se então definir métricas que melhor se aproximem da euclidiana, manipulando-se somente valores inteiros. Borgefors (1984), citado em Thiel (1991), introduziu as chamadas distâncias de chanfro que ponderam cada deslocamento elementar no espaço discreto por um inteiro em um domínio de vizinhança considerado. Para as métricas d_4 e d_8 dá-se uma ponderação de 1 para os deslocamentos elementares. Essas métricas envolvem o conceito de 4 vizinhos e 8 vizinhos: em d_4 consideram-se deslocamentos verticais e horizontais; em d_8 consideram-se adicionalmente deslocamentos diagonais, figura 2.9.

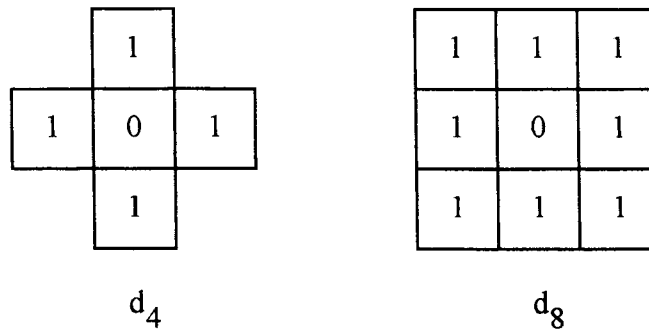


Figura 2.9. Ponderações para deslocamentos associados às métricas d_4 e d_8

Vem a idéia natural de ponderar os deslocamentos elementares de forma a melhor se aproximar da distância euclidiana, como 1 para os deslocamentos aos primeiros vizinhos diretos (horizontal e vertical) e $\sqrt{2}$ para os deslocamentos aos primeiros vizinhos indiretos (na diagonal). Agora, os valores de deslocamentos $(1, \sqrt{2})$ são aproximados por $(1, 4/3)$.

A distância de chanfro assim definida denomina-se d_{3-4} , e a figura 2.10 ilustra a representação de sua máscara.

$\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$	4	3	4
1	P	1	3	P	3
$\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$	4	3	4

Figura 2.10. Ponderações Locais para a máscara d_{3-4}

Chanfros envolvendo vizinhanças maiores foram também propostas, como a d_{5-7-11} obtida a partir da aproximação $(1, \sqrt{2}, \sqrt{5})$ em $(1, 7/5, 11/5)$, figura 2.11.

	$\sqrt{5}$		$\sqrt{5}$				$\sqrt{5}$		$\sqrt{5}$	
$\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{5}$	11	7	5	7	11	
	1	P	1			5	P	5		
$\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{5}$	11	7	5	7	11	
	$\sqrt{5}$		$\sqrt{5}$			11		11		

Figura 2.11. O Chanfro d_{5-7-11}

Entretanto, deve-se considerar que embora ocorra uma diminuição nos erros de distância quando se utilizam chanfros envolvendo vizinhanças mais extensas, tem-se uma maior complexidade nos cálculos associados. Um tratamento bastante completo sobre as distâncias de chanfro pode ser encontrado em Thiel (1991). Este trabalho utiliza o chanfro d_{3-4} devido sua simplicidade e pelos bons resultados fornecidos. Na figura 2.12, mostra-se a comparação dos resultados obtidos por Laurent et alii (1993) para a distribuição de poros de uma imagem da estrutura do concreto celular quando se consideram como elementos estruturantes o círculo, o chanfro d_{3-4} e o d_{5-7-11} . O tempo necessário para a avaliação da distribuição de poros desta imagem do concreto celular (512x512 pixels), em uma máquina com processador 68040, é em

torno de uma hora e meia utilizando-se o círculo e em torno de 2 minutos utilizando-se o chanfro d_{3-4} (Laurent et alii, 1993).

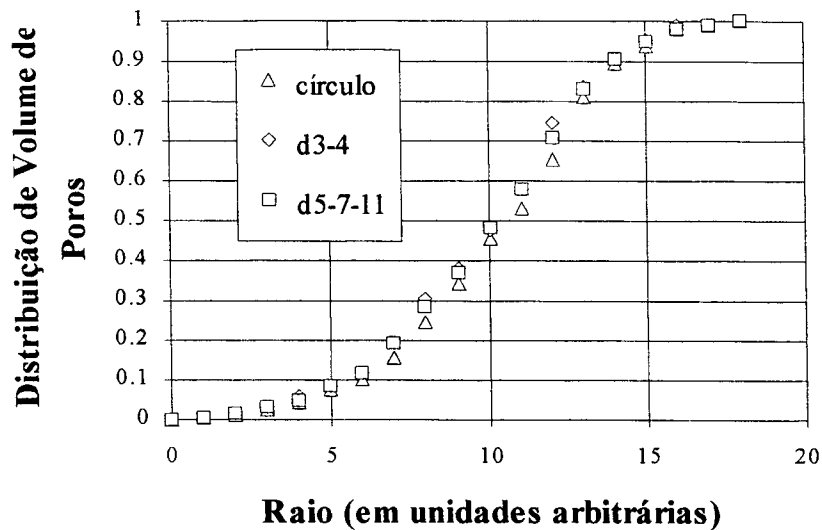


Figura 2.12. A influência da métrica na obtenção da distribuição de poros. Extraído de Laurent et alii (1993).

Para se calcular a distância entre dois pontos P e Q quaisquer no espaço discreto Z^2 geram-se os valores intermediários de distância entre P e Q; este cálculo é descrito no apêndice A.

2.5.4 Imagem de Distância ao Fundo.

Considere-se uma imagem binária, que pode ser representada por uma matriz bidimensional assumindo para cada pixel os valores 0 ou 1, onde por exemplo, o valor 0 corresponde à matriz sólida aqui denominada fundo, e o valor 1 ao espaço poroso cujos objetos se quer descrever. Denomina-se imagem de distância ao fundo (IDF) a uma outra imagem, obtida operando-se sobre a imagem binária original uma transformação global, onde para cada ponto da fase de interesse (aqui o espaço poroso) é atribuído o valor correspondente à sua distância mínima à fase complementar (o fundo, a matriz sólida). É claro, deve-se especificar uma métrica para a avaliação de distâncias. O conceito de IDF é essencial nas operações de análise de imagens, correspondendo a uma nova codificação da imagem com informação adicional. De fato, em um

código de imagem binária tem-se somente a informação para cada ponto, da fase a que pertence; no código de IDF além da informação da fase tem-se codificado para cada ponto sua distância ao fundo (a codificação do fundo permanece inalterada em 0). A utilização da codificação em IDF reduz consideravelmente o número de testes a ser efetuado, por exemplo, nas operações de erosão e dilatação.

Para o cálculo de IDF foram propostos vários algoritmos, veja-se Chassery e Montanvert (1992). Este trabalho utiliza o algoritmo seqüencial na métrica d_{3-4} — descrito no apêndice A — que necessita apenas duas passagens sobre a imagem.

Um pequeno exemplo do código em IDF é mostrado na figura 2.13.

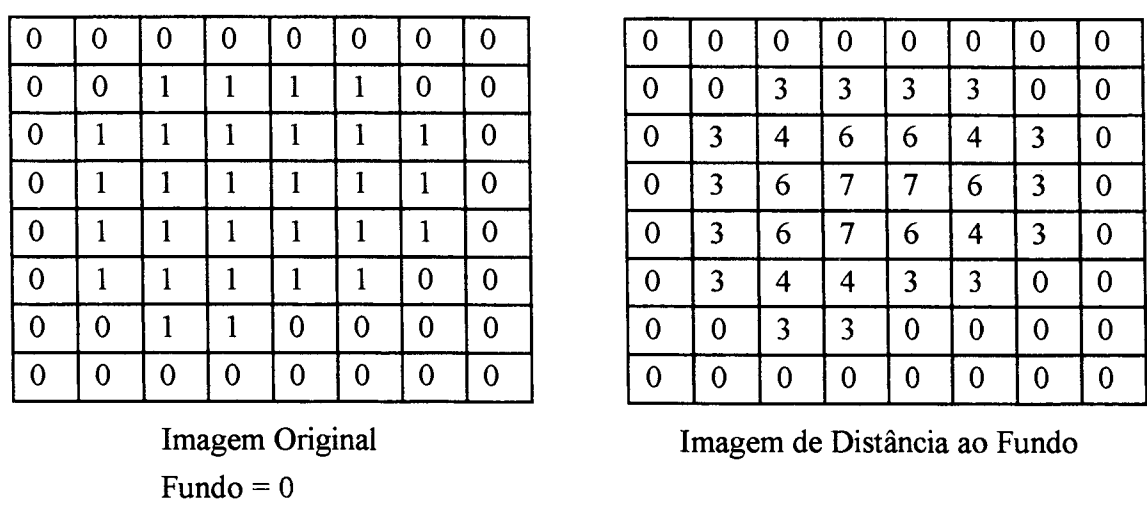


Figura 2.13. Uma Imagem Binária e sua Codificação em IDF com métrica d_{3-4} .

2.5.5 Bolas de Chanfro como Elementos Estruturantes.

Pode-se gerar uma bola de raio R para um dado tipo de chanfro valendo-se do algoritmo construtivo da IDF, considerando-se uma imagem de tamanho infinito onde cada ponto tem o valor 1 exceto o centro que tem o valor 0, correspondendo ao fundo. A bola é assim gerada, pois cada ponto terá o valor atribuído de sua distância ao centro. Na figura 2.14 mostra-se o comportamento das bolas geradas para as métricas d_4 , d_8 e d_{3-4} , que são respectivamente um paralelogramo, um quadrado e um octógono. À medida que se sofisticava a métrica o número de lados do polígono gerado cresce, tendendo ao círculo.



Figura 2.14. Aspecto das bolas para as métricas d_4 , d_8 e d_{3-4}

Um algoritmo eficiente, gerando uma matriz unidimensional V — de tamanho $2R+1$, sendo R o raio da bola — representando a bola de chanfro d_{3-4} é descrito no apêndice A.

2.5.6 Operações de Erosão e Dilatação com Elementos Estruturantes d_{3-4} sobre a IDF.

Como dito anteriormente, a IDF contém uma informação adicional em relação à imagem binária: o valor da distância de cada ponto dos objetos à fase complementar. Como será visto nesta seção, essa informação torna bastante simples as operações de erosão e dilatação. Caso as operações fossem realizadas diretamente sobre a imagem binária seria necessário, para cada ponto da imagem (não fundo) testar todos os pontos gerados pelo elemento estruturante.

A fim de se observar o comportamento das operações de erosão e dilatação em um objeto codificado em IDF, considere-se o elemento estruturante também como objeto codificado em IDF, figura 2.15, a ser comparado com os objetos da imagem.

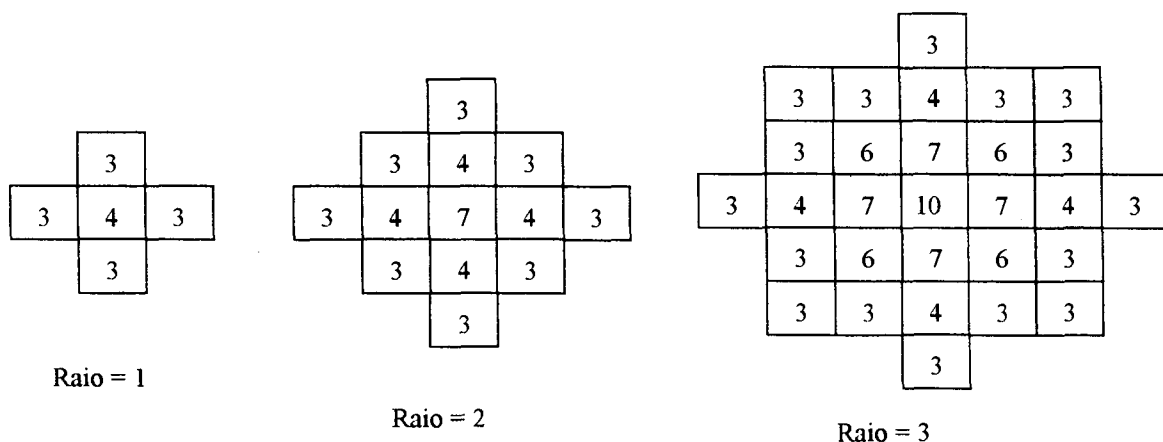


Figura 2.15. IDF dos Elementos Estruturantes d_{3-4} com raios de 1 a 3.

O valor do ponto de centro de cada elemento estruturante (codificado em IDF) de raio R é $3R+1$. Dessa forma em qualquer objeto representado em IDF, todo ponto de valor igual ou superior a $3R+1$ pode ser centro de um chanfro d_{3-4} de raio R e incluso no objeto em consideração. Ora, o erodido de um objeto é o conjunto de pontos, onde implantado o elemento estruturante ele é contido no objeto. O erodido é então o conjunto de centro de bolas de chanfro incluso no objeto. Portanto da observação anterior o erodido de um objeto (codificado em IDF) por um chanfro d_{3-4} de raio R é o conjunto de pontos com valor superior a $3R$.

O dilatado de um objeto por um chanfro d_{3-4} de raio R será o conjunto dos centros de bola com uma intersecção não nula com o objeto. Considerando-se a simetria das bolas em relação ao seu centro, o dilatado pode ser tomado como o conjunto de bolas cujo centro pertence ao objeto. Evidentemente basta percorrer os pontos do contorno do objeto, e gerar em torno de cada ponto a bola de raio R .

Resumindo, uma operação de abertura com uma bola de chanfro d_{3-4} de raio R será realizada de acordo com as etapas:

- i) erosão: conserva-se os pontos de valor de IDF superior a $3R$;
- ii) dilatação: os pontos do contorno do objeto terão valor de IDF compreendido entre $]3R, 3(R+1)]$ e os do interior valores superiores a $3(R+1)$. Conserva-se os pontos interiores. Gera-se a bola em torno dos pontos do contorno do objeto.

A descrição da operação de abertura na forma de algoritmo é realizada no apêndice A.

2.6. Granulometria. Obtenção da Distribuição Acumulada de Volumes de Poros

A granulometria é o estudo da distribuição de tamanhos de objetos. A origem do termo vem da experiência de determinação da distribuição de tamanho de grãos — de materiais como por exemplo a areia — Coster e Chermant (1989). Neste experimento, faz-se passar uma amostra conveniente de areia por peneiras de tamanhos de malhas crescentes e mede-se a massa do conteúdo de areia retido em cada peneira: cada peneira conterá os grãos de areia de tamanho superior ao de sua malha. A análise granulométrica necessita de uma entidade de medida para relacionar a distribuição com o tamanho dos objetos: no caso acima com peneiras

essa entidade é a massa; na análise de imagens pode-se valer do comprimento, da área superficial ou do volume.

Ora, uma operação de abertura com um elemento estruturante B_x de tamanho D é análoga ao método acima com uma malha de tamanho característico D . Determina-se a função distribuição de tamanhos de poros realizando-se uma seqüência de operações de abertura sobre uma imagem binária S com um elemento estruturante de tamanho crescente. Nesse caso a grandeza medida é a área superficial dos poros e a função distribuição é dada por:

$$F(d \leq D) = \frac{\varepsilon(S) - \varepsilon_a(S, D)}{\varepsilon(S)} \quad (2.10.)$$

onde:

$F(d \leq D)$ é a fração de poros de tamanhos d menores ou iguais a D ;

$\varepsilon(S)$ é a fração em área total dos poros (a porosidade da imagem S);

$\varepsilon_a(S, D)$ é a fração de área dos poros de tamanho superior a D , ou seja, os poros remanescentes na imagem após a operação de abertura com elemento estruturante de tamanho D .

O algoritmo para a operação de abertura foi implementado e utilizado nas imagens de aumentos de 200X e 3200X da argamassa, permitindo descrever sua função distribuição no espectro de diâmetros variando de aproximadamente $20\mu\text{m}$ até 1250\AA .

Uma ilustração da operação de abertura é mostrada na figura 2.16 para a imagem de 3200X submetida a um elemento estruturante de diâmetro igual a 6 pixels (3750\AA). O cálculo da distribuição de poros completa, para a imagem de 3200X (405×308 pixels), em um microcomputador 486 da linha PC (munido de coprocessador matemático e operando na frequência de 33 MHz), exige tempo de processamento em torno de um minuto.

A distribuição dos poros de diâmetro igual ou inferior a 1250\AA (até 200\AA) foi obtida a partir da isoterma de adsorção de vapor de água e o estudo explicativo dessa determinação pode ser encontrado em Philippi (1991), Yunes (1992) e Philippi et alii (1994).

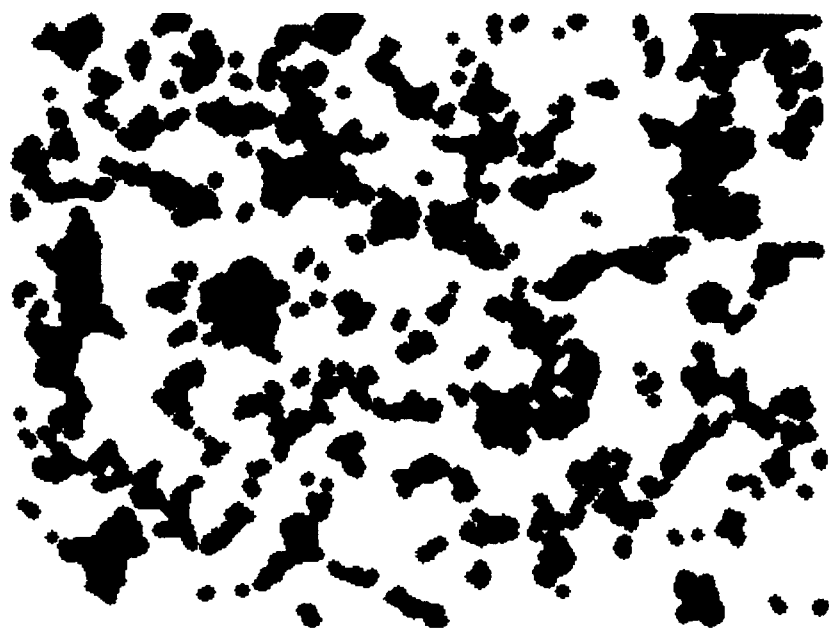


Figura 2.16. A imagem de 3200X submetida a uma operação de abertura.

Na figura 2.17 pode-se observar a distribuição de volume de poros da argamassa cobrindo a faixa de diâmetros de 200Å a aproximadamente 20μm.

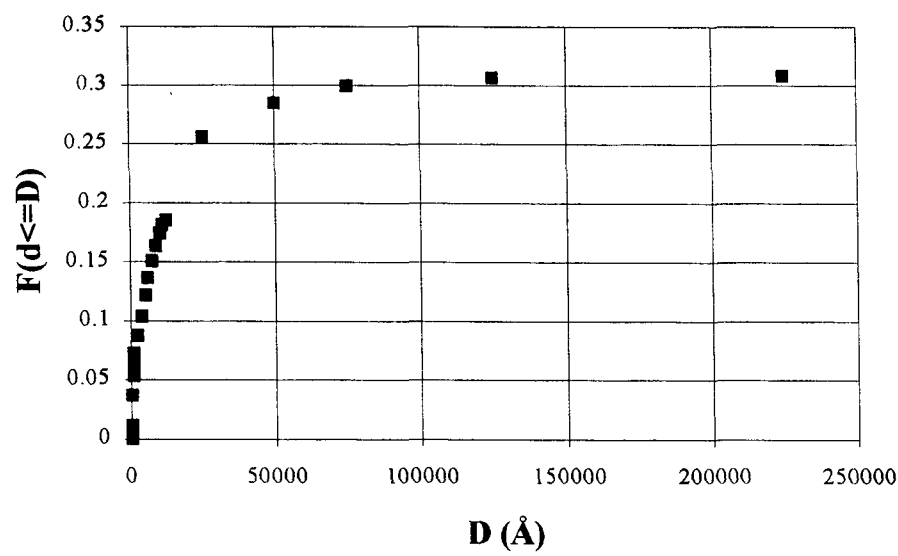


Figura 2.17. A função distribuição acumulada de volume de poros para a argamassa.

Quanto à operação de abertura deve ser notado, observe-se as figuras 2.2 e 2.16, que esta operação separa cada objeto conexo¹ da imagem em partes de acordo com o diâmetro. Um objeto é separado em classes de diâmetro e podemos ainda distinguir essas partes em cavidades, gargantas e proeminências (veja-se ilustração na figura 2.18). As proeminências são estreitamentos junto à uma cavidade, diferenciando-se dessa forma das gargantas. Ressalte-se que esses conceitos são subjetivos e finalmente tanto cavidades, gargantas e proeminências são poros num senso geral. A questão básica é que a abertura de fato realiza uma divisão do espaço poroso por classes de diâmetros, ou escalas, a nível de cada objeto conexo. Voltaremos a esse assunto mais adiante quando da discussão sobre reconstituição de espaços porosos em sistemas multiescalas.

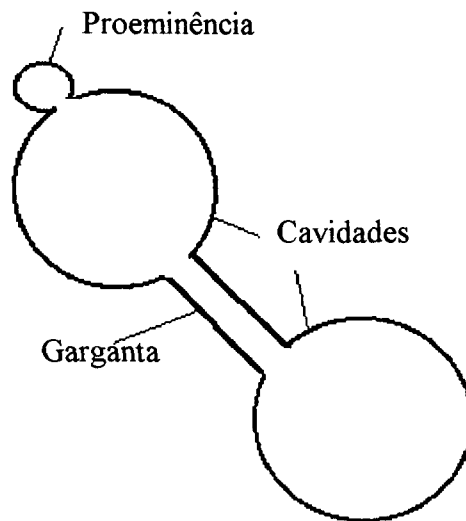


Figura 2.18. Um esquema para cavidades, garganta e proeminência em um objeto conexo.

2.7. Obtenção da Frequência de Gargantas

Como já observado, em uma imagem como a da pasta de ligantes representada na figura 2.2, ocorre a existência de elementos de conexão, que são estreitamentos entre duas cavidades, comumente denominados de gargantas. Também, como já dito, tanto gargantas como cavidades

¹Intuitivamente, diz-se que um objeto é conexo quando ele é constituído de um só "pedaço". Para uma definição rigorosa recorrer a Kuelkamp (1988).

são em verdade poros (um mesmo objeto conexo); a distinção é aqui feita para por exemplo, considerar a influência das gargantas em processos de invasão de fluido não-molhante. Um esquema típico dessas configurações cavidades-gargantas é mostrado na figura 2.19.

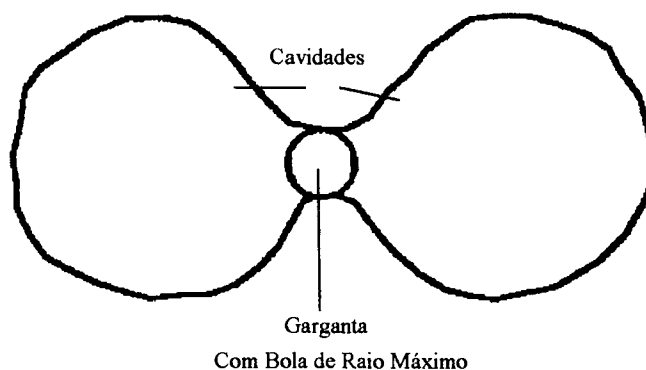


Figura 2.19. Representação esquemática de uma garganta e da bola de raio máximo nela contida.

Para detectar gargantas em um objeto conexo de uma imagem, aplica-se uma seqüência de erosões com um elemento estruturante de raio crescente, sobre uma mesma imagem original de distância ao fundo, veja-se ilustração na figura 2.20. Após cada erosão verifica-se se houve separação do objeto em várias partes (em outros sub-objetos conexos). Caso isto ocorra, fica caracterizada a existência de uma ou mais gargantas, de raio igual ao do elemento estruturante.

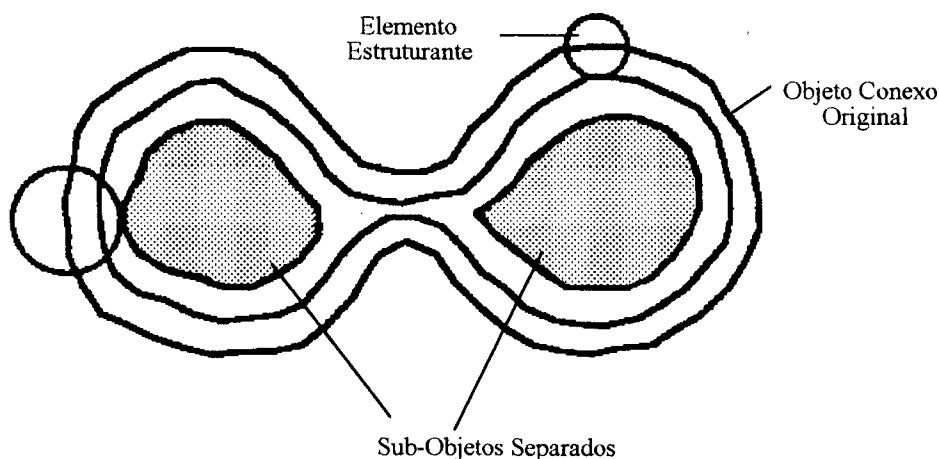


Figura 2.20. Erosões sucessivas até o raio de bola que separa o objeto inicial.

O conhecimento da função distribuição de volume de poros e da frequência em número de gargantas pode ser utilizado para a construção de um modelo de rede randômica de percolação de sítios (poros) e ligações (gargantas). Neste modelo, o volume do espaço poroso é totalmente atribuído aos sítios, e as gargantas funcionam apenas como "janelas", condicionando a invasão de mercúrio nos sítios.

Geralmente as imagens possuem vários objetos conexos. Uma primeira idéia seria a de considerar cada objeto em separado e proceder a seqüência de erosões visando a contagem de gargantas. No entanto, esse procedimento exigiria um grande tempo computacional. Realiza-se, então, uma rotulação (ou etiquetagem) dos objetos: a cada objeto conexo — considerando-se um esquema de oito vizinhos — é atribuído um número inteiro que o diferencia dos demais. Neste trabalho utilizou-se um algoritmo de rotulação, que é devido a Hoshen e Kopelman (1976) que necessita de apenas uma passagem sobre a imagem. Este algoritmo originalmente concebido para um esquema de quatro vizinhos é facilmente adaptado para um esquema de oito vizinhos. Para a seqüência de erosões, utiliza-se como anteriormente, elementos estruturantes $d_{3,4}$. O algoritmo global para a determinação da frequência de gargantas desenvolvido por este trabalho, é escrito de forma simplificada abaixo.

i) A partir de uma imagem original binária $IMG(i,j)$ construir a imagem de distância ao fundo $IDF(i,j)$

ii) Rotular $IMG(i,j)$

iii) Para raio de bola nulo, até o raio de bola que torna nula a porosidade de $IDF(i,j)$ faça:

Operação de erosão em $IDF(i,j)$

Se $IDF(i,j)$ é igual a fundo, fazer $IMG(i,j)$ igual a fundo

Somar o número de rótulos diferentes em $IMG(i,j)$ e atribuir a $NObjfalso$

Rotular $IMG(i,j)$ e somar o número de rótulos diferentes atribuindo a $NObjverdadeiro$

Fazer número de gargantas para o dado raio de bola igual à diferença entre $NObjverdadeiro$ e $NObjfalso$.

Este algoritmo foi implementado, e utilizado inicialmente para o objeto da figura 2.21, com o intuito de se observar sua performance. A tela gráfica do programa computacional nos permite localizar de forma aproximada as gargantas, o que é esquematizado na própria figura 2.21. Na figura 2.22 são mostrados os resultados do número de gargantas para esta imagem.

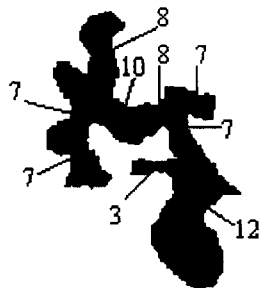


Figura 2.21. Um objeto conexo e a localização aproximada de suas gargantas. O pixel é de tamanho arbitrário. Os números na figura indicam os raios das gargantas em pixel.

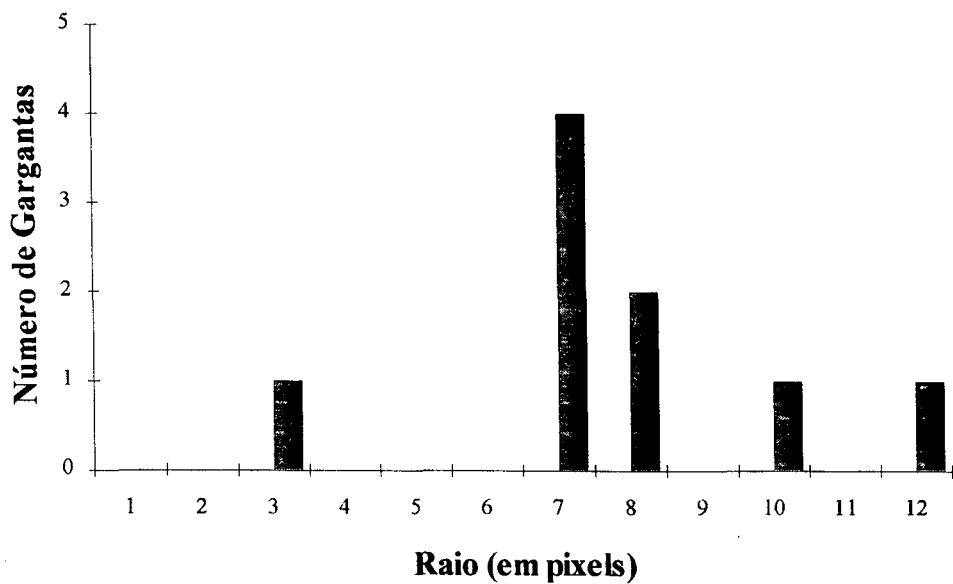


Figura 2.22. A frequência de gargantas para o objeto da figura 2.21.

Em seguida, procedeu-se a mesma determinação para a imagem da argamassa associada ao aumento de 3200X. Os resultados do número de gargantas em função do tamanho podem ser vistos na figura 2.23.

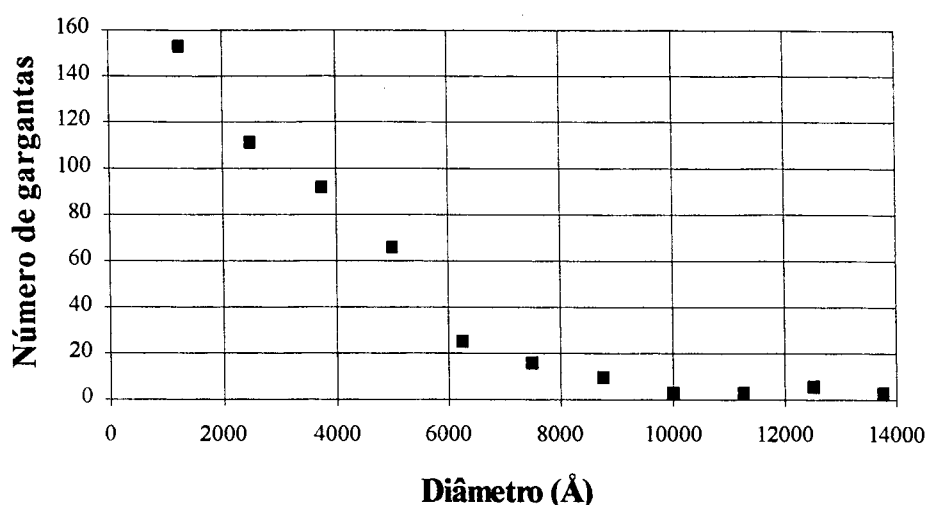


Figura 2.23. O número de gargantas em função do diâmetro para a imagem de aumento de 3200X.

2.8. Considerações Gerais

A caracterização microestrutural de materiais porosos, baseada nas imagens digitalizadas, se mostra extremamente poderosa. De fato, uma vez de posse da imagem digitalizada um grande número de técnicas de análise são disponíveis para a caracterização morfotopológica. Dentre elas citam-se a erosão e dilatação, a representação de imagens em códigos de árvore quaternária e a técnica bastante recente do gráfico da linha mediana (Montanvert, 1987; Chassery e Montanvert, 1991; Thiel, 1991; Pieritz, 1994).

Claramente, a base de todas essas metodologias são as imagens digitalizadas que para a maioria das técnicas devem ser binárias. Assim, deve-se dispor primeiramente de boas micrografias representando a microestrutura do material poroso. Entende-se por "boas micrografias", micrografias que apresentem uma imagem plana e com alto contraste entre as fases presentes (onde o contorno dos objetos estará bem definido). Para muitos materiais, e aqui se inclui a argamassa de cal e cimento, a preparação das amostras e a observação microscópica são bastante difíceis.

A binarização é um passo fundamental e complicado. Uma boa binarização depende da qualidade da micrografia e do método utilizado. Nós acreditamos que a binarização é mais fortemente influenciada pela qualidade da micrografia. De fato, em micrografias extremamente

planas e com grande diferença de contraste entre as fases (matriz sólida e espaço poroso) a binarização se apresenta fácil com o uso de qualquer um dos métodos citados, pois a imagem não apresentará muitos níveis de cinza, ou seja, ela é quase binária. Contrariamente, em uma imagem como a da pasta de ligantes desse trabalho, mesmo com o uso de métodos mais elaborados sempre restará uma ponta de subjetividade na definição das fases. Para a época em que se realizou este trabalho aliada a vários fatores (como espaço de tempo, bibliografia e infra-estrutura computacional entre outros) a binarização para a imagem de 3200X foi realizada, como já dito, em software comercial baseada no histograma de níveis de cinza.

O Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas de Materiais tem voltado a atenção para esta questão, e estudos — baseados nas técnicas de detecção de contornos — vêm sendo realizados por Pieritz (1994) em sua dissertação de mestrado. Um desenvolvimento bastante interessante realizado por Pieritz (1994), consiste em realizar a binarização por detecção de contornos a nível de cada objeto conexo, melhorando a solução do problema de diferença de contraste para a mesma fase sólida em regiões distintas da imagem.

CAPÍTULO 3

CARACTERIZAÇÃO DE INVARIANTES GEOMÉTRICOS DE ESPAÇOS POROSOS

3.1. Introdução

Mandelbrot (1982) inicia o seu "The Fractal Geometry of Nature" como a nos lembrar que as nuvens não são esferas, as montanhas cones, nem tampouco as ilhas círculos. Ele introduziu o conceito de geometria fractal para descrever esses objetos complexos, complementando a geometria euclidiana.

Em verdade, a noção de fractais reúne vários trabalhos anteriores (do fim do século XIX) de matemáticos como Cantor, Peano, Esses matemáticos, a essa época, haviam inventado curvas contínuas contudo não retificáveis — curvas que não se pode medir seu comprimento, como por exemplo, a curva de Koch — e curvas contínuas mas não diferenciáveis em todos os pontos (Gouyet, 1992).

O termo fractal se origina do latim "fractus" denotando quebrado, fracionado ao infinito (Mandelbrot, 1982).

Talvez o fascínio por esta teoria apareça quando se pensa que os variados problemas físicos envolvendo estruturas geometricamente complexas são de solução bastante difícil — tome-se, por exemplo, o caso da estrutura da pasta de ligantes, ou a escala da rede de fissuras da argamassa, que aqui se mostrarão fractais — contudo a descrição em termos de geometria fractal é relativamente simples.

Para muitos objetos os conceitos de geometria fractal estão ligados às propriedades de invariância na mudança de escala: uma parte da estrutura fractal se parece com o todo; a estrutura se parece, observada de perto ou de longe.

A partir do final dos anos 70, um grande número de trabalhos em variados domínios de pesquisa, têm tratado deste tema. Cita-se aqui: Witten e Sander (1981), Weitz e Oliveria (1984), Katz e Thompson (1985), Jacquin e Adler (1987), Lange et alii (1990) e Posadas

Durand e Crestana (1991). Esses autores têm observado o caráter fractal de vários tipos de estrutura, incluindo materiais porosos e sistemas de agregados de partículas.

Este capítulo introduz sucintamente as noções de geometria fractal baseado no trabalho de Gouyet (1992), que é recomendado para uma consulta detalhada. Depois, procede-se a determinação da dimensão fractal para as imagens da pasta de ligantes e da escala das fissuras.

3.2. Noção de Dimensão

Considere-se inicialmente o problema da medição de um objeto caracterizado por um comprimento, uma superfície ou um volume. Um método usualmente empregado consiste em recobrir o objeto de interesse por meio de células elementares, onde um segmento de reta, um elemento de superfície ou de volume são tomados como unidade de medida, veja-se ilustração na figura 3.1. A medida M assim obtida será dada por:

$$M = N\ell^d = N\mu \quad (3.1.)$$

onde:

ℓ é o tamanho de um lado da célula de medida (que pode ser uma linha, um quadrado ou um cubo);

N é o número de células necessário ao recobrimento do objeto;

d é a dimensão do objeto;

$\mu = \ell^d$ é a unidade de medida.

Freqüentemente, do nosso conceito intuitivo de dimensão tomamos $d=0,1,2,3$ respectivamente para os objetos a, b, c, d da figura 3.1. Contudo, Gouyet (1992) cita alguns matemáticos que propuseram certos objetos para os quais o método acima falha. Isto conduz à introdução, por exemplo, do método dito α -medição de recobrimento e à dimensão de Hausdorff-Besicovitch, descrito a seguir.

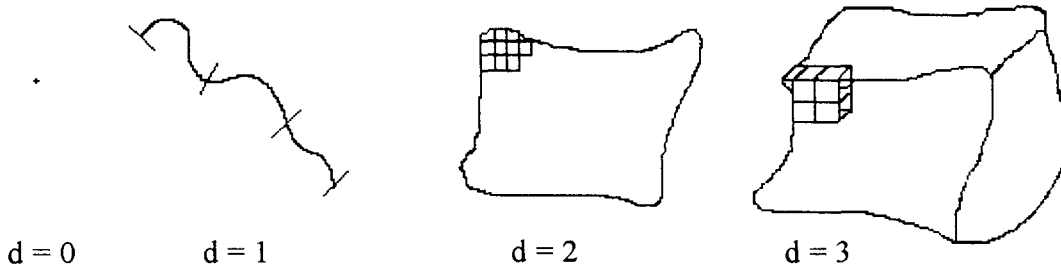


Figura 3.1. Recobrimento de linhas, superfícies e volumes.

3.3. A Dimensão de Hausdorff-Besicovitch

Considere-se agora o problema de se medir a dimensão de um objeto E . Pode-se seguir a idéia de recobrimento do objeto por células — pertencentes ao espaço no qual o objeto está imerso — de unidade de medida $\mu = \ell^{d(E)}$, onde novamente ℓ é o tamanho do lado da célula e $d(E)$ é a dimensão do objeto E . Tome-se, como feito em Gouyet (1992), um quadrado de lado L , sendo recoberto por células quadradas de lado ℓ . Imagine-se que se desconheça a dimensão do quadrado, e então se fará ensaios tomando a unidade de medida $\mu = \ell^\alpha$ onde α é o parâmetro desconhecido. Ora, como visto a medida M será igual a $N\mu$, onde fazendo $N = (L/\ell)^2$ vem:

$$M = L^2 \ell^{\alpha-2} \quad (3.2.)$$

Suponha-se inicialmente $\alpha = 1$, o que significa que quando $\ell \rightarrow 0$ ter-se-á $M \rightarrow \infty$. Para $\alpha = 3$, encontra-se que quando $\ell \rightarrow 0$, $M \rightarrow 0$. Para $\alpha = 2$, obtém-se a superfície do quadrado. O que se pretende com este método é uma generalização para dimensões não inteiras. Nessa generalização o recobrimento do objeto E é feito com bolas V_i onde o diâmetro das bolas ($\text{diam } V_i$) é menor ou igual a ℓ : isto significa que se toma o limite inferior da soma das unidades $\mu = (\text{diam } V_i)^\alpha$.

A chamada α -medição de recobrimento é definida matematicamente como:

$$m^\alpha(E) = \lim_{\ell \rightarrow 0} \inf \left\{ \sum (\text{diam } V_i)^\alpha : \cup V_i \supset E, \text{diam } V_i \leq \ell \right\} \quad (3.3.)$$

e a dimensão de Hausdorff-Besicovitch:

$$\begin{aligned} \dim(E) &= \inf \{ \alpha : m^\alpha(E) = 0 \} \\ &= \sup \{ \alpha : m^\alpha(E) = \infty \} \end{aligned} \quad (3.4.)$$

A $\dim(E)$ é o valor de α onde a medida faz um salto de zero a infinito (como no exemplo acima da medida em um quadrado).

A definição de $\dim(E)$ dada na equação anterior pode ser entendida, talvez mais facilmente, dizendo que ela é um único número $\dim(E)$ tal que :

$$\begin{aligned} \text{se } \alpha < \dim(E) , m^\alpha(E) &= \infty, \\ \text{se } \alpha > \dim(E) , m^\alpha(E) &= 0. \end{aligned} \quad (3.5.)$$

3.4. A Dimensão de Bouligand-Minkowski

Seja novamente um objeto E imerso em um espaço euclidiano de dimensão d . Denota-se $E(\ell)$ o conjunto de pontos nesse espaço distantes de no máximo ℓ de E , veja-se a figura 3.2. O conjunto $E(\ell)$ consiste do dilatado do objeto E , como definido na operação de morfologia matemática da seção 2.5.2.

A dimensão de Bouligand-Minkowski é definida por:

$$\Delta(E) = \lim_{\ell \rightarrow 0} \left(d - \frac{\ln \text{Vol}_d(E(\ell))}{\ln \ell} \right) \quad (3.6.)$$

onde $\text{Vol}_d(E(\ell))$ é o "volume" do dilatado $E(\ell)$ na dimensão d .



Figura 3.2. O dilatado de uma curva E . Extraído de Gouyet (1992).

3.5. Igualdade entre D_f , $\dim(E)$ e $\Delta(E)$

Gouyet (1992) apresenta, sem demonstração, o seguinte teorema:

Se existe um real D_f e uma medida finita μ positiva tal que para todo x pertencente a um objeto E e para a bola $B_r(x)$ de raio r centrada em x ocorre:

$$\frac{\ln \mu(B_r(x))}{\ln r} \rightarrow D_f, \text{ então } D_f = \dim(E) \text{ onde } D_f \text{ é a denominada}$$

"dimensão de massa". Ainda, se a convergência é uniforme sobre E , vem: $D_f = \dim(E) = \Delta(E)$.

Este teorema que é aplicável para a maioria dos casos — veja-se Gouyet (1992) — nos dá então a igualdade entre as citadas dimensões e o nome mais conhecido, devido a Mandelbrot (1982), é o de dimensão fractal, que aqui será utilizado indistintamente.

Uma relação importante que dá a massa no interior de uma bola de raio r é oriunda do teorema acima¹:

$$M = \mu(B_r(x)) \propto r^{D_f} \quad (3.7.)$$

¹A notação \propto significa "varia como": $a \propto b$ significa que a razão a/b tende assintoticamente a uma constante não nula.

3.6. Exemplos de Fractais

As estruturas fractais podem ser de natureza determinística ou estatística. Os fractais determinísticos podem ser construídos por um processo de recorrência valendo-se de um iniciador, que define o estado inicial, e um gerador, que opera a recorrência. Exemplos dessas estruturas são a bastante conhecida curva de Koch e o tapete de Sierpinski. Essas estruturas permitem variados tipos de construções e abaixo serão vistas as mais simples e conhecidas. Os fractais estatísticos podem ser construídos ou naturais, como por exemplo as linhas formadas por fronteiras terrestres entre países e costas marítimas, um estudo realizado por L. F. Richardson em 1961, também citado a seguir.

3.6.1. Medição do Comprimento de Fronteiras Terrestres e Costas Marítimas. Os Experimentos de Richardson

Imagine que se queira, com o uso do método de recobrimento descrito na seção 3.2., medir o comprimento de uma costa marítima bastante recortada como a da Inglaterra. Este é um problema que já pode ser considerado clássico, descrito em Mandelbrot (1982) e Gouyet (1992), veja-se ilustração na figura 3.3.

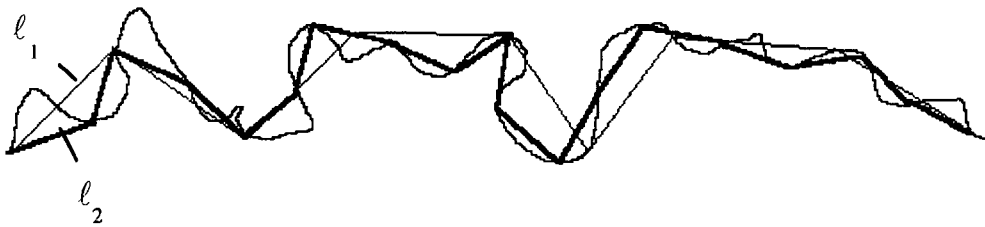


Figura 3.3. Medição do comprimento de uma linha bastante recortada com diferentes unidades de medida.

Para uma unidade de medida ℓ_1 tem-se um comprimento $L(\ell_1) = N_1 \ell_1$, contudo, para uma unidade menor ℓ_2 , encontra-se um comprimento maior:

$$\begin{aligned} L(\ell_1) &= N_1 \ell_1 \\ L(\ell_2) &= N_2 \ell_2 > N_1 \ell_1 \end{aligned} \quad (3.8.)$$

De fato, é intuitivo que à medida que se toma uma unidade de medida menor consegue-se captar mais detalhes do objeto que é bastante recortado. L. F. Richardson, citado em Mandelbrot (1982) e Gouyet (1992) a partir de medições de diversas fronteiras e costas, veja-se figura 3.4, constatou que de maneira geral, em uma faixa de valores de ℓ , o comprimento $L(\ell)$ varia de acordo com a lei de potência:

$$L(\ell) \propto \ell^{-\alpha} \quad , \quad \alpha > 0 \quad (3.9.)$$

Como o expoente α é positivo, significa que o comprimento L da linha cresce à medida que ℓ decresce: a curva é portanto não retificável. O expoente α é um invariante na transformação de escala, e a dimensão fractal, como será visto na seção 3.6.4., é dada por $D_f = 1 + \alpha$. Pode ser notado que para uma curva como o círculo, veja-se figura 3.4, o comprimento é constante ($\alpha = 0$) para unidades de medida pequenas em relação ao seu raio de curvatura.

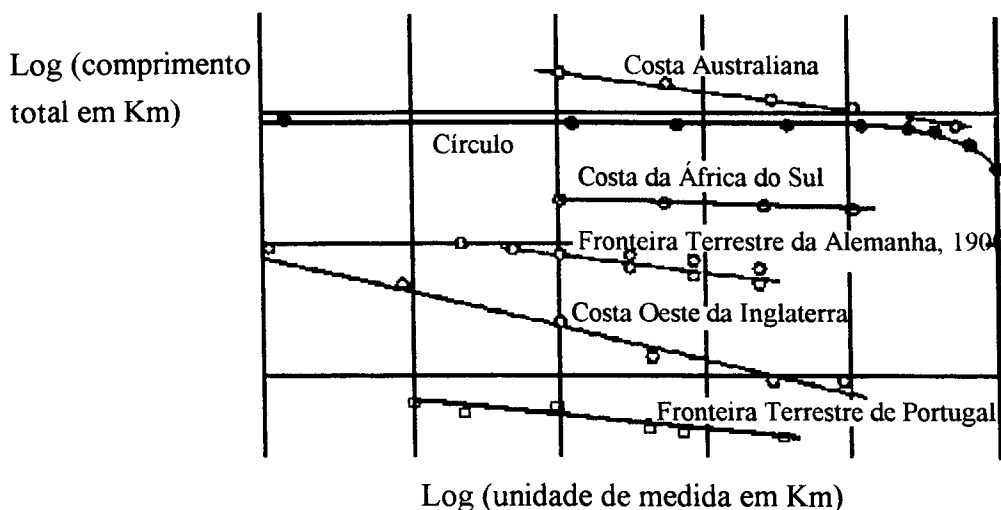


Figura 3.4. Medição do Comprimento de Fronteiras Terrestres e Costas Marítimas. Os Experimentos de Richardson. Extraído de Mandelbrot (1982).

3.6.2. A Curva de Koch

O iniciador, o gerador e a construção da curva de Koch até a terceira iteração, são ilustrados na figura 3.5.

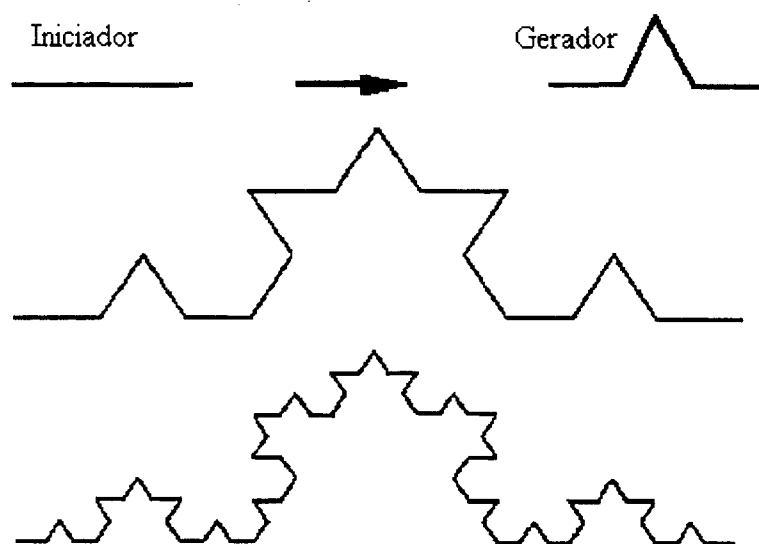


Figura 3.5. A geração da curva de Koch.

Neste processo, cada segmento de comprimento ℓ é substituído por uma linha quebrada formada por quatro segmentos de comprimento $\ell/3$ (o gerador). Dessa forma, as relações para os comprimentos L_n da curva, para um iniciador de tamanho L , vêm:

$$\begin{aligned}\ell_1 &= L/3 \rightarrow L_1 = 4\ell_1 \\ \ell_2 &= L/9 \rightarrow L_2 = 16\ell_2\end{aligned}\tag{3.10.}$$

$$\ell_n = (L/3)^n \rightarrow L_n = 4^n \ell_n$$

Assim, o comprimento L_n em função da unidade de medida ℓ_n pode ser escrito como:

$$L_n = L^{D_f} (\ell_n)^{1-D_f}\tag{3.11.}$$

onde $D_f = \frac{\ln 4}{\ln 3} \cong 1.2619$

Aqui encontra-se novamente o expoente $\alpha = D_f - 1$, como na lei de Richardson da seção anterior:

$$L_n \propto \ell_n^{-\alpha} \quad (3.12.)$$

O parâmetro $\alpha \cong 0.2619$ de novo denota um invariante na mudança de escala.

Em objetos que se sabe a priori serem autosimilares — um tratamento matemático formal sobre autosimilaridade e construção de objetos autosimilares pode ser encontrado em Adler (1992) — como a curva de Koch, a dimensão fractal, especificamente a dimensão de massa (Gouyet, 1992), ou a dimensão de similaridade como chamada em Adler (1992) pode ser obtida diretamente através de duas iterações da construção do objeto, através da relação:

$$D_f = \frac{\ln(N(\ell))}{\ln(1/\ell)} \quad (3.13.)$$

Para o caso da curva de Koch, vêm:

$$D_f = \frac{\ln 4}{\ln 3} = \frac{\ln 16}{\ln 9} = \dots \cong 1.2619$$

3.6.3. O Tapete de Sierpinski.

Esta é uma estrutura fractal bastante interessante, por vezes utilizada com o intuito de representar a estrutura porosa de materiais para a simulação de fenômenos físicos, veja-se Adler (1988). A ilustração de sua geração é mostrada na figura 3.6. A dimensão fractal do tapete de Sierpinski é $D_f = \frac{\ln 8}{\ln 3} \cong 1.8928$. No tapete de Sierpinski, a porosidade tende ao valor unitário quando o número de passos de geração tende ao infinito.

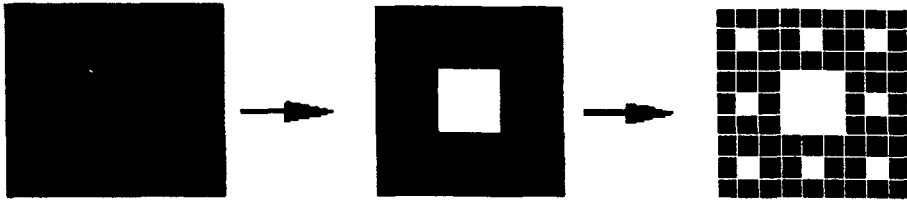


Figura 3.6. O tapete de Sierpinski

3.6.4. Obtenção da Dimensão Fractal através da Relação $M(r) \propto r^{D_f}$

O cálculo de D_f , para um objeto determinístico como a curva de Koch ou o tapete de Sierpinski, pode ser feito através da relação $M(r) \propto r^{D_f}$, dada na equação 3.7. Para tanto, considerando-se apenas os dois primeiros passos da geração, procede-se a medida da massa contida no interior das bolas circulares de raios iguais a 1, 3, e 9, veja-se figura 3.7. A massa a ser contada nesse caso, se refere aos números de unidades elementares para cada escala de observação.

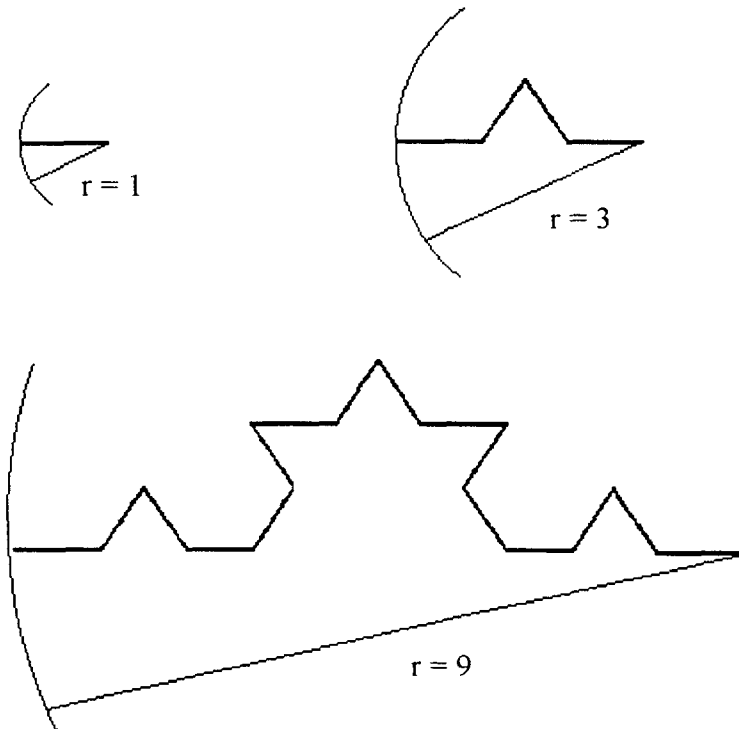


Figura 3.7. Medida da massa no interior de uma bola para a curva de Koch.

O procedimento mostrado na figura 3.7 é equivalente a considerarmos ampliações no objeto inicial de comprimento igual a 1 por um fator 3 a cada passo de geração. Dessa forma, a cada passo de geração, o raio da bola que envolve o objeto é multiplicado por 3.

As medidas de massa M , no interior das bolas de raio r , serão dadas por:

$$\begin{aligned} r = 1 &\rightarrow M = 1 \\ r = 3 &\rightarrow M = 4 \\ r = 9 &\rightarrow M = 16 \end{aligned}$$

Assim, para a primeira e segunda ampliações, quando se começa a observar irregularidades na curva de Koch, tem-se:

$$\frac{\ln(M(r))}{\ln(r)} = \frac{\ln(4)}{\ln(3)} = \frac{\ln(16)}{\ln(9)} = D_f \cong 1.2619$$

Quando se trabalha com o método de recobrimento, por exemplo na curva de Koch, procura-se determinar o comprimento $L(\ell)$ da curva em função da unidade de medida ℓ . Neste caso, como visto anteriormente, valem as relações $M(\ell) = L(\ell) = N(\ell) \cdot \ell \propto \ell^{-\alpha}$, onde aqui, o que se chama de massa está associado ao comprimento total do objeto para a dada escala ℓ .

Assim, para a curva de Koch, como feito anteriormente considerando-se a figura 3.5, têm-se os valores:

$$\begin{aligned} \ell = 1 &\rightarrow M(\ell) = L(\ell) = 1 \\ \ell = 1/3 &\rightarrow M(\ell) = L(\ell) = 4/3 \\ \ell = 1/9 &\rightarrow M(\ell) = L(\ell) = 16/9 \end{aligned}$$

Dessa forma, vêm:

$$\frac{\ln(L(\ell))}{\ln(\ell)} = \frac{\ln(4/3)}{\ln(1/3)} = \frac{\ln(16/9)}{\ln(1/9)} = -\alpha \cong -0.2619$$

Note-se que para a relação $M(r) \propto r^{D_f}$, a massa se refere ao números de elementos do objeto contidos na bola de raio r , enquanto que na relação $M(\ell) = L(\ell) = N(\ell) \cdot \ell \propto \ell^{-\alpha}$, a massa está associada ao comprimento total do objeto para a dada escala, ou seja, $N(\ell) \cdot \ell$. Ora, multiplicando-se o comprimento total do objeto, pelo inverso da unidade de medida da escala, $1/\ell$, obtém-se novamente o número de elementos do objeto. Nas duas relações para a massa, a diferença está simplesmente em uma mudança de escala, obedecendo $\ell = 1/r$. Dessa forma, o número de elementos contados no interior da bola de raio r , $M(r)$, é igual ao número de elementos necessários ao recobrimento do objeto, $N(\ell)$. Pode-se então escrever que $N(\ell) \cdot \ell \propto \ell^{-\alpha} = N(1/r) \cdot (1/r) \propto (1/r)^{-\alpha}$, e dessa maneira $N(1/r) \propto r^{1+\alpha}$. Como $N(1/r) = M(r) \propto r^{D_f}$ vem que $\alpha = D_f - 1$.

De outra forma, partindo-se da equação $M(r) \propto r^{D_f}$, podemos escrever que $M(1/\ell) \propto \ell^{-D_f}$. Mas, $M(1/\ell) = N(\ell)$ e como $N(\ell) \propto \ell^{-\alpha-1}$ segue que $\alpha = D_f - 1$.

Mostra-se, então, sobre o exemplo da curva de Koch considerado, a equivalência entre as relações $M(r) \propto r^{D_f}$ e $M(\ell) \propto \ell^{-\alpha}$.

Utiliza-se o mesmo procedimento anterior para o tapete de Sierpinski, considerando-se novamente dois estágios de geração e bolas quadradas de raios iguais a 1, 3 e 9, veja-se figura 3.8.

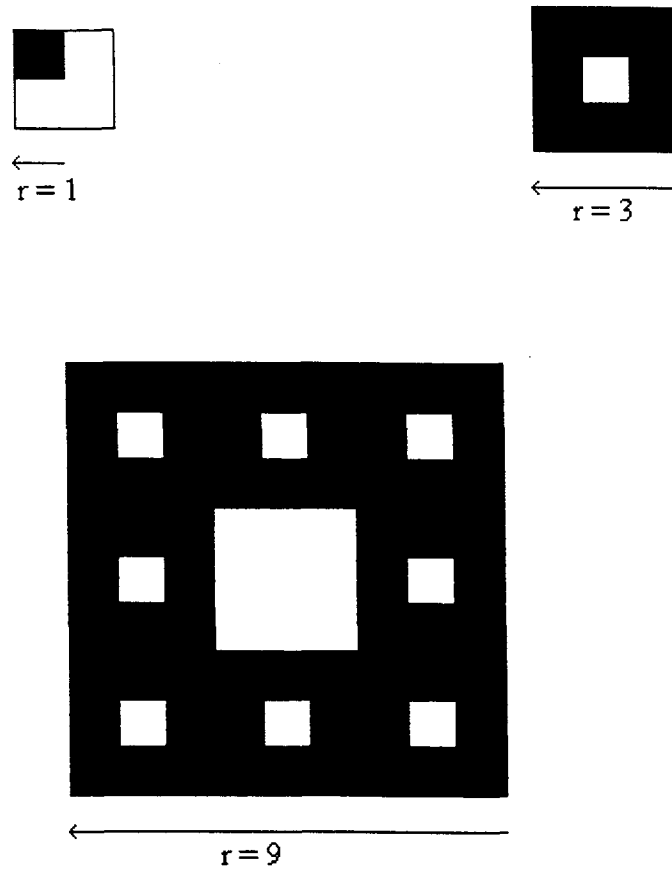


Figura 3.8. Medida da massa no interior de uma bola de raio r para o tapete de Sierpinski. Por razões de comodidade apenas a bola quadrada de raio igual a 1 é mostrada.

Para a relação $M(r) \propto r^{D_r}$ tem-se os resultados:

$$\begin{aligned} r = 1 &\rightarrow M(r) = 1 \\ r = 3 &\rightarrow M(r) = 8 \\ r = 9 &\rightarrow M(r) = 64 \end{aligned}$$

Assim,

$$\frac{\ln(M(r))}{\ln(r)} = \frac{\ln(8)}{\ln(3)} = \frac{\ln(64)}{\ln(9)} \cong 1.8928$$

Quando se faz o recobrimento do tapete com elementos quadrados, a relação é dada por $M(\ell) = N(\ell) \cdot \ell^2 \propto \ell^\alpha$, onde ℓ é o lado do quadrado. Nesta relação, a massa escala com ℓ^α , $\alpha > 0$, uma vez que para o tapete de Sierpinski, quando se diminui a unidade de medida ℓ , a massa também diminui. Obtêm-se os resultados:

$$\ell = 1 \rightarrow M(\ell) = 1 \times (1)^2$$

$$\ell = 1/3 \rightarrow M(\ell) = 8 \times (1/3)^2$$

$$\ell = 1/9 \rightarrow M(\ell) = 64 \times (1/9)^2$$

assim,

$$\frac{\ln(M(\ell))}{\ln(\ell)} = \frac{\ln(8/9)}{\ln(1/3)} = \frac{\ln(64/81)}{\ln(1/9)} = \alpha \cong 0.1072$$

Escreve-se, $N(1/r) \cdot (1/r)^2 \propto (1/r)^\alpha$, de maneira que $N(1/r) \propto r^{2-\alpha}$. Como anteriormente visto para a curva de Koch, tem-se $N(1/r) = M(r) \propto r^{D_f}$, donde segue que $\alpha = 2 - D_f$.

3.7. Determinação Prática da Dimensão Fractal

O interesse aqui reside na determinação da dimensão fractal de objetos naturais, especificamente o espaço poroso de materiais. Existem diversos métodos com essa finalidade, o que pode ser visto em Gouyet (1992). Dentre os vários métodos, esse trabalho utiliza primeiramente o das caixas. Outra maneira também utilizada consiste em se apoiar na relação existente entre a função autocorrelação (ou o covariograma) e a dimensão fractal, o que será descrito abaixo. Ainda, uma vez que, no presente trabalho, para o espectro poroso de diâmetros inferiores a 1250Å não se dispõe de imagens mas somente as

informações contidas na função distribuição de poros, faz-se uma análise da distribuição na tentativa de se caracterizar para a dada região um invariante na transformação de escala.

3.7.1. O Método das Caixas

Este método consiste em contar o número de objetos de interesse em função da escala de observação. Assim, seja $N(\ell)$ o número de quadrados de tamanho ℓ que contém parte da estrutura em análise em uma malha de recobrimento, figura 3.9.

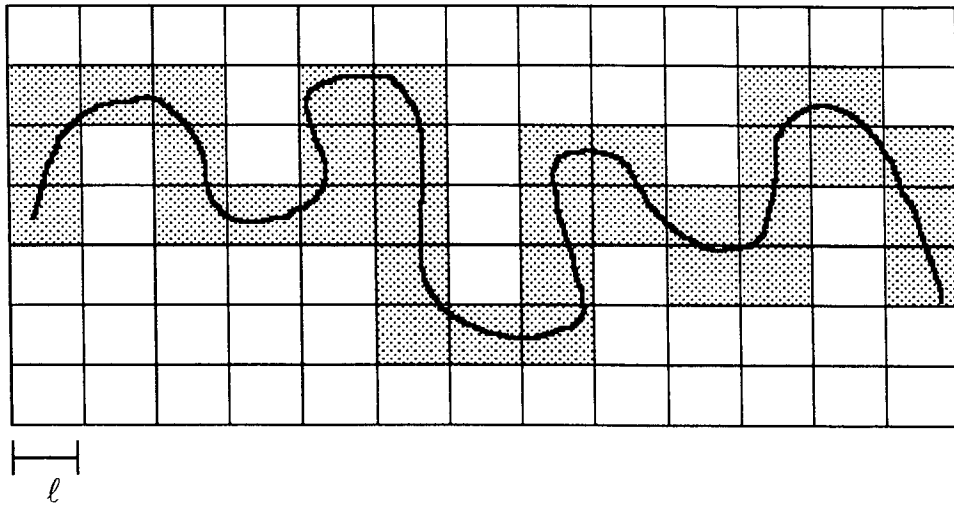


Figura 3.9. Ilustração para o método das caixas. As caixas a serem contadas são as hachuradas.

A dimensão fractal é calculada a partir de:

$$D_f = \frac{\ln(N(\ell))}{\ln(1/\ell)} \quad (3.14.)$$

Para a execução desta idéia, Posadas e Crestana (1991), Jorge et alii (1992) procedem a abertura de uma janela quadrada de tamanho conveniente que recobre todo o objeto a partir de seu centro de gravidade, realizando divisões exatas dessa janela por potências de

dois. Ainda, Jorge et alii (1992) realizam a contagem dos objetos por um processo de busca através do algoritmo de árvore quaternária. No caso deste trabalho, onde as imagens de interesse são em geral retangulares, abre-se uma janela que coincide com a imagem e procede-se a divisão por inteiros que vão da unidade até o tamanho do menor lado da imagem, incrementados da unidade. Note-se que para o caso de imagens retangulares o domínio de trabalho passa a ser o quadrado associado ao menor lado do retângulo original. Considera-se para cada divisão o número inteiro de quadrados obtidos, desprezando-se assim o restante da imagem, veja-se figura 3.10. Este procedimento aproximado é adotado uma vez que a divisão por potências de dois a partir de um quadrado original de tamanho conveniente permite obter poucos pontos de $N(\ell)$ em função de ℓ .

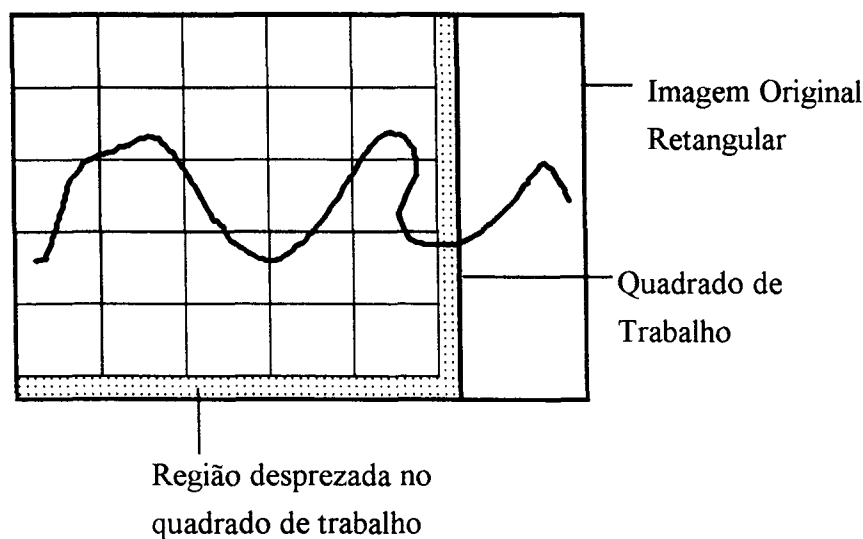


Figura 3.10. O método das caixas aproximado utilizado neste trabalho.

Em outro método, veja-se ilustração na figura 3.11, simplesmente são construídos domínios de tamanho característico ℓ variável (círculos, retângulos, quadrados), geralmente concêntricos, para a obtenção da variação do número de objetos de interesse em função de ℓ (Witten e Sander, 1981; Weitz e Oliveria, 1984). Isto é precisamente a relação de massa no interior de uma bola de raio ℓ dada pela equação 3.7.

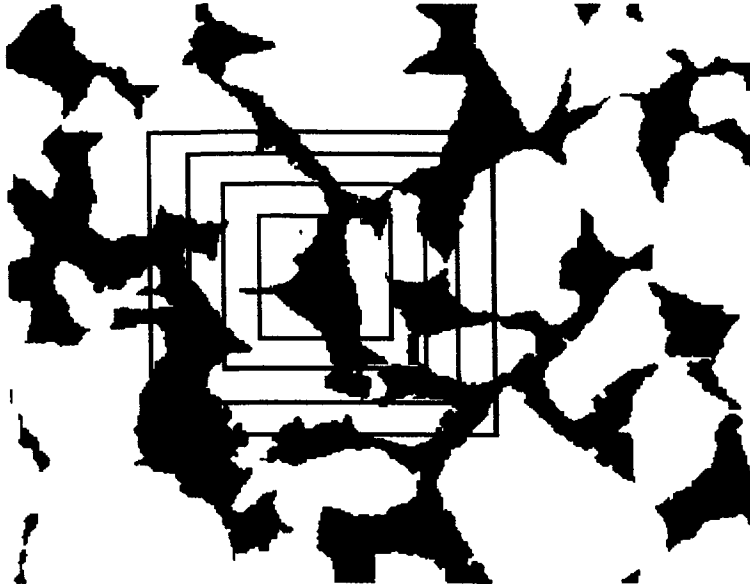


Figura 3.11. Medição da massa no interior de domínios de tamanho variável. Os quadrados são concêntricos a um ponto P pertencente ao espaço poroso. A massa se refere ao número de pixels no interior do quadrado.

No caso deste trabalho não se obteve bons resultados com este método, construindo-se quadrados concêntricos a partir do centro geométrico da imagem. De fato, uma vez definido um ponto para a construção dos quadrados, limita-se de início a uma região da imagem sob análise, o que deve ocasionar problemas de representatividade estatística. Contrariamente o método das caixas opera sempre sobre a imagem total, amenizando a falta de estatística local.

3.7.2. Obtenção da Dimensão Fractal através da Função Covariograma

Vários autores se valeram da função autocorrelação (ou o covariograma) com esse fim: Witten e Sander (1981), Weitz e Oliveria (1984), Katz e Thompson (1985), Meakin (1986), Lange et alii (1990) e Vicsek (1992) citado em Posadas Durand (1994). Este trabalho se apóia diretamente sobre a função covariograma, equação (2.6.) aqui reescrita como:

$$C_{pp}(\mathbf{u}) = \langle P(\mathbf{x})P(\mathbf{x} + \mathbf{u}) \rangle$$

Tomando-se uma origem arbitrária $\mathbf{x} = 0$, pertencente ao espaço poroso, tem-se :

$$C_{pp}(\mathbf{u}) = \langle P(0)P(\mathbf{u}) \rangle \quad (3.15.)$$

Esta é uma outra maneira de se considerar e avaliar o covariograma. A partir de um ponto pertencente ao espaço poroso tomado como origem arbitrária, traça-se bolas de raio u variáveis, calculando para cada u a frequência de ocorrências de pontos na borda da bola pertencentes ao espaço poroso. Também, a massa M contida no interior da bola de raio u será:

$$M(u) = \int_{\substack{\text{domínio da} \\ \text{bola de raio } u}} \langle P(\mathbf{r}) \rangle d^2\mathbf{r} = \int_{\substack{\text{domínio da} \\ \text{bola de raio } u}} \langle P(0)P(\mathbf{r}) \rangle d^2\mathbf{r} = \int_{\substack{\text{domínio da} \\ \text{bola de raio } u}} C_{pp}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \quad (3.16.)$$

Em palavras, a equação anterior nos diz que a integração da função covariograma no domínio constituído por uma bola dá a massa no interior da bola. Agora, da equação 3.7. vem:

$$M(u) = \int_{\substack{\text{domínio da} \\ \text{bola de raio } u}} C_{pp}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} \propto u^{D_f} \quad (3.17.)$$

assim, pode-se escrever:

$$C_{pp}(u) = \frac{d^2 M(u)}{du^2} \propto u^{D_f - 2} \quad (3.18.)$$

Dessa forma vem que $C_{pp}(u) \propto u^{-\alpha}$, onde $\alpha = 2 - D_f$.

3.7.3. Análise da Função Distribuição Acumulada de Poros

Para a distribuição acumulada de um espaço poroso fractal na faixa de diâmetros $D_1 \leq D \leq D_2$, a dependência do volume acumulado de poros com seus diâmetros D deve seguir uma lei de potência da forma (Neimark, 1989):

$$V_p(d \geq D) \propto D^{-\alpha} \quad (3.19)$$

onde:

$V_p(d \geq D)$ é o volume de poros acumulado de diâmetro superior a D , dado por $(\varepsilon - F(d \leq D))$, onde $F(d \leq D)$ é a distribuição de poros com diâmetro inferior a D , como definida anteriormente.

De acordo com esta lei, à medida que se acrescenta irregularidades no espaço poroso, a partir dos maiores poros, o volume acumulado apresenta o invariante α na mudança de escala, que é a própria idéia de um objeto fractal.

Neste trabalho não foi possível obter uma relação formal entre o invariante α da lei de escala para $V_p(d \geq D)$ e a dimensão fractal. Para o covariograma, como mostrado na seção anterior vale $\alpha = 2 - D_f$, pois se trabalhou com imagens bidimensionais. Do desenvolvimento da seção anterior, segue que para imagens tridimensionais tem-se que $\alpha = 3 - D_f$. Isto é facilmente visto para meios homogêneos e isotrópicos, pois o covariograma do meio tridimensional, em uma dada direção, e o covariograma de uma seção plana do meio devem ser iguais, de forma a fornecer os mesmos invariantes. Assim, a dimensão fractal do meio tridimensional será igual à da seção plana, adicionada de 1, Lange et alii (1990), Adler (1992). Baseado nestas considerações, nós tomamos o invariante da lei de escala para $V_p(d \geq D)$ como² $\alpha = 2 - D_f$.

²Notar que esta é a mesma relação obtida no tapete de Sierpinski, seção 3.6.4.

3.8. Aplicação dos Métodos

Os métodos descritos acima foram utilizados na tentativa de se caracterizar a dimensão fractal da pasta de ligantes. Empregaram-se a imagem de 3200X mais a informação dada pela função distribuição para os pequenos poros. Para a escala das fissuras, utilizou-se a imagem de aumento 200X.

3.8.1. Resultados Obtidos para a Pasta de Ligantes

Sobre a imagem digitalizada de aumento de 3200X, figura 2.2, aplicou-se o método das caixas obtendo-se a variação de $N(\ell)$ com $1/\ell$. A determinação da dimensão fractal é feita a partir da inclinação da parte linear da curva $\ln(N(\ell)) \times \ln(1/\ell)$, mostrada na figura 3.12.

Na figura 3.13, mostra-se a função covariograma obtida no capítulo 2, agora na forma $\ln(C_{pp}(u)) \times \ln(u)$.

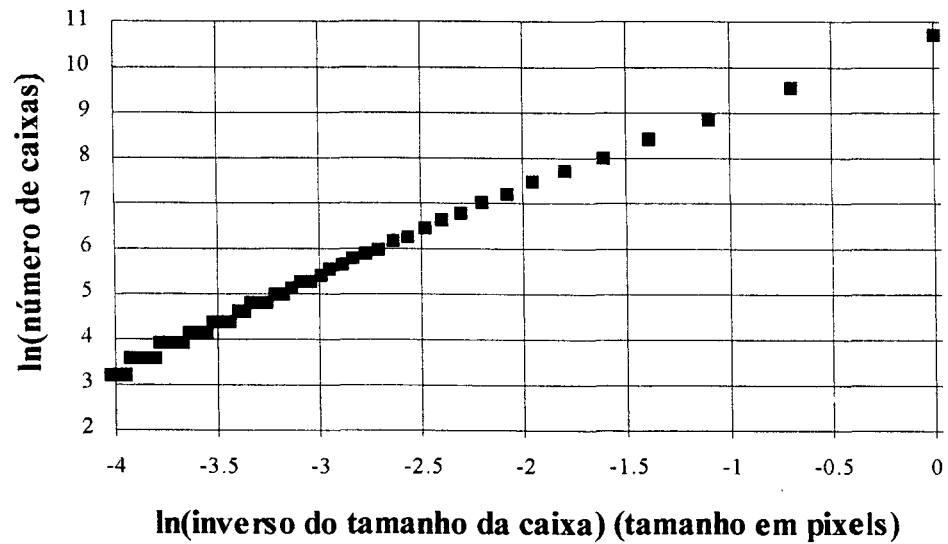


Figura 3.12. Resultados do método das caixas para a imagem de aumento 3200X.

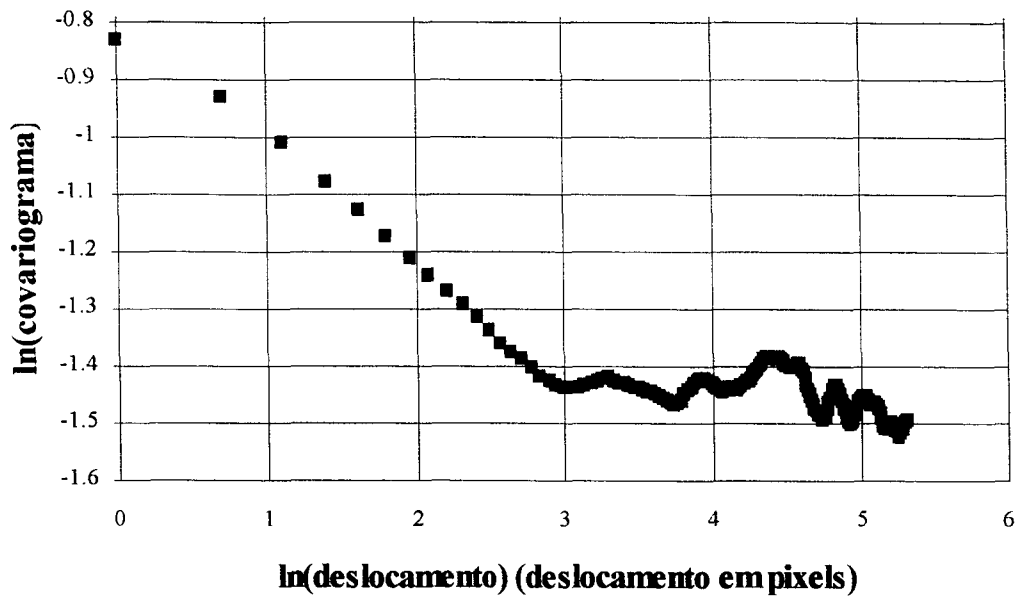


Figura 3.13. A função covariograma na forma logarítmica para a imagem de 3200X.

Do gráfico contido na figura 3.12 observa-se uma parte linear na curva para $\ln(1/\ell)$ variando de 0 até aproximadamente -3. Este é o domínio de escalas onde se faz o recobrimento da imagem com quadrados pequenos e o método aproximado utilizado se comporta bastante bem. A dimensão fractal calculada para esta região apresenta o valor (1.77 ± 0.02) com um coeficiente de correlação linear de 0.9992. Para a vizinhança do ponto onde $\ln(1/\ell)$ assume o valor -3, e para valores superiores em módulo, tem-se uma mudança na declividade, como também ocorre para o covariograma, figura 3.13 no ponto de deslocamento correspondente a $\ln(u)$ igual a 3; este ponto está associado a um comprimento característico de aproximadamente 12500Å. Além desse ponto, para comprimentos de escala superiores, a imagem se apresenta homogênea, o que equivale a uma dimensão fractal igual a 2 (Katz e Thompson, 1985).

Com a função covariograma calculou-se a dimensão fractal na região de deslocamentos de 2 pixels até 20 pixels — o que equivale a $\ln(u)$ igual a 3 — . Obteve-se a partir da declividade nessa região um invariante α igual a 0.231 ± 0.001 , com um coeficiente de correlação de 0.9997, e dessa maneira a dimensão fractal será igual a 1.769 ± 0.001 . Notifica-se que, para a imagem de aumento de 3200X, foi analisado o comportamento da

função covariograma com os valores médios obtidos para as quatro rotações não se encontrando praticamente nenhuma diferença, com respeito ao invariante e a faixa em que a função se apresenta linear, em relação aos resultados da figura 3.13.

Na figura 3.14 mostra-se a distribuição de poros na forma $\ln(V_p(d \geq D)) \times \ln(D)$, para todo o espectro poroso da argamassa.

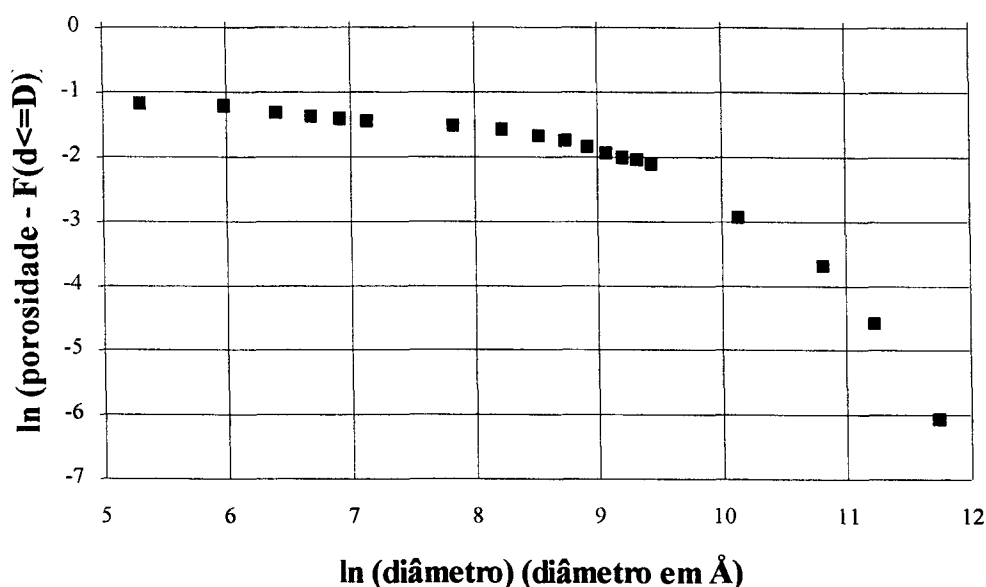


Figura 3.14. O volume acumulado de poros $V_p(d \geq D)$ para a argamassa.

Da figura 3.14 considerando-se somente os pontos da distribuição obtidos a partir da isoterma de adsorção o invariante obtido é de 0.206 ± 0.005 com um coeficiente de correlação de 0.9991, o que dá uma dimensão fractal de 1.794 ± 0.005 . Quando se consideram os pontos da região obtidos a partir da isoterma de adsorção mais aqueles obtidos a partir da imagem de aumento 3200X, com a técnica de abertura, o que compreende do menor poro até os de diâmetro igual a 12500 Å , o invariante encontrado apresenta o valor de 0.24 ± 0.02 com um coeficiente de correlação de 0.97, o que fornece uma dimensão fractal de 1.76 ± 0.02 .

Estes resultados foram obtidos considerando-se a função distribuição de volumes de poros para todo o espectro poroso da argamassa. Quando se considera a distribuição de

poros da imagem de 3200X isoladamente, não foi possível a avaliação de um invariante, pois a curva obtida não se apresenta linear. Esta questão necessita ser melhor investigada, uma vez que ela pode envolver algum problema conceitual, ou meramente operacional.

3.8.2. Conclusões Sobre os Resultados Obtidos na Pasta de Ligantes

Para a imagem de aumento de 3200X, representando a pasta de ligantes, as dimensões fractais obtidas pelo método das caixas (1.77 ± 0.02) e através da função de covariograma (1.769 ± 0.001) concordam bastante bem. Estes valores também concordam razoavelmente bem com aqueles obtidos por meio da função distribuição acumulada de volume de poros — a qual fornece o resultado de 1.794 ± 0.005 quando se consideram apenas os pontos da distribuição obtidos a partir da isoterma de adsorção e de 1.76 ± 0.02 quando adicionalmente a esses pontos se incluem aqueles obtidos pela operação de abertura na imagem de aumento de 3200X. A dimensão fractal é uma informação global do espaço poroso, contudo, a razoável concordância entre os resultados (considerados os dados de distribuição obtidos a partir da isoterma de adsorção e da imagem de 3200X, cuja independência é notória) é um indicador qualitativo de que a imagem de 3200X representa adequadamente o espaço poroso da pasta de ligantes.

A imagem de 3200X apresenta como maiores poros os de diâmetro de aproximadamente 20000 \AA , sendo encontrado um limite de transição de meio heterogêneo para homogêneo para comprimentos de 12500 \AA . Isto significa que, acima de comprimentos de escala de 12500 \AA , a porosidade da imagem de 3200X se torna constante.

3.8.3. Resultados Obtidos para a Escala das Fissuras.

A aplicação do método das caixas sobre a imagem de 200X fornece os resultados que são mostrados na figura 3.15. Pode-se observar uma parte linear na curva para $\ln(1/\ell)$ variando de aproximadamente -1 a em torno de -4. Contudo, os valores inferiores a $\ln(1/\ell)$ igual a -3 se apresentam mais dispersos, em função provavelmente do método aproximado utilizado. Dessa forma calculou-se a dimensão fractal utilizando-se os pontos até -3, obtendo-se o valor de 1.668 ± 0.018 , com um coeficiente de correlação de 0.9990.

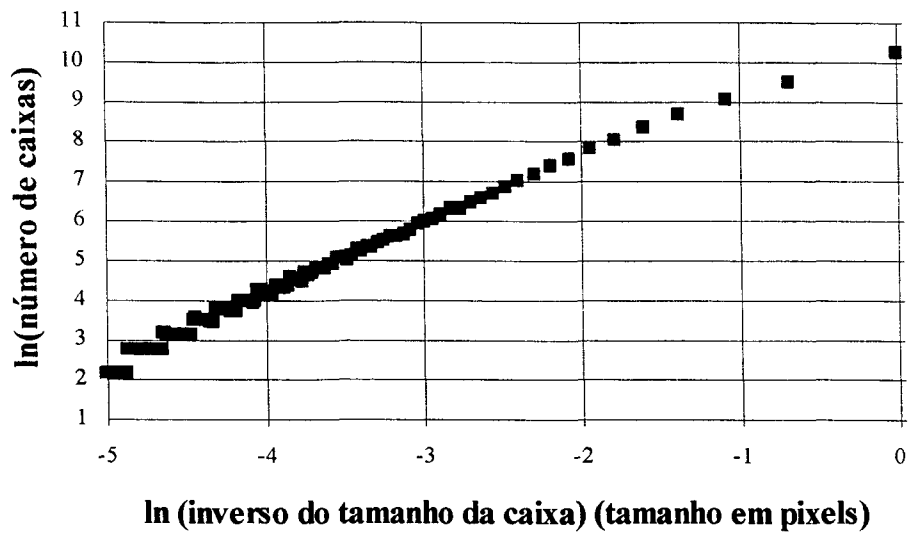


Figura 3.15. O método das caixas para a imagem de aumento 200X.

Na figura 3.16 mostra-se o covariograma na forma logarítmica para a imagem de 200X. Observa-se a parte linear até $\ln(u)$ em torno de 3, negligenciando os dois primeiros valores de deslocamento. Para essa região o invariante apresenta o valor -0.367 ± 0.004 o que conduz a uma dimensão fractal de 1.633 ± 0.004 onde o coeficiente de correlação vale 0.9990.

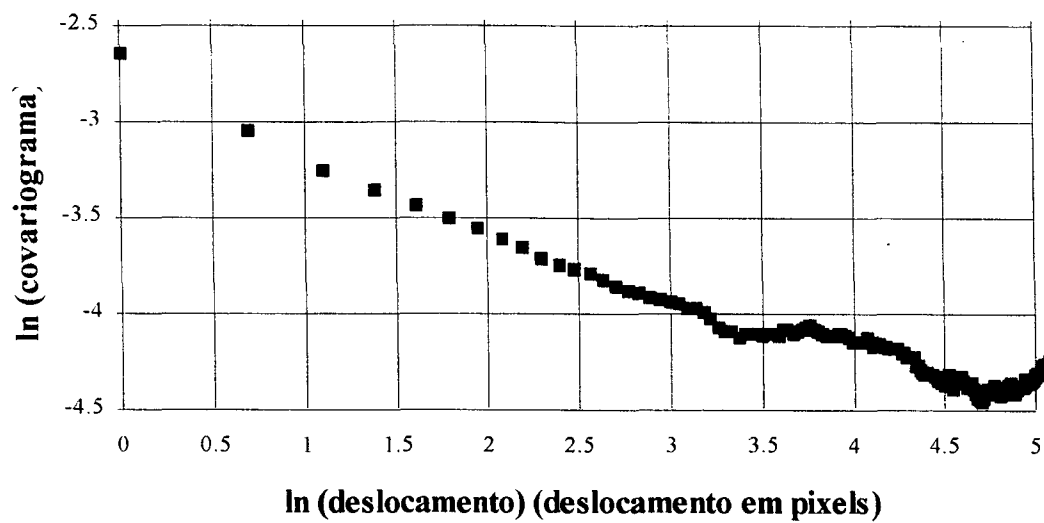


Figura 3.16. A função covariograma na forma logarítmica para a imagem de 200X.

Em seguida, considerou-se para cada deslocamento o valor médio de covariograma obtido nas quatro rotações, como feito na seção 2.4 e mostrado na figura 2.5. Os resultados médios de covariograma são mostrados na figura 3.17 na forma logarítmica.

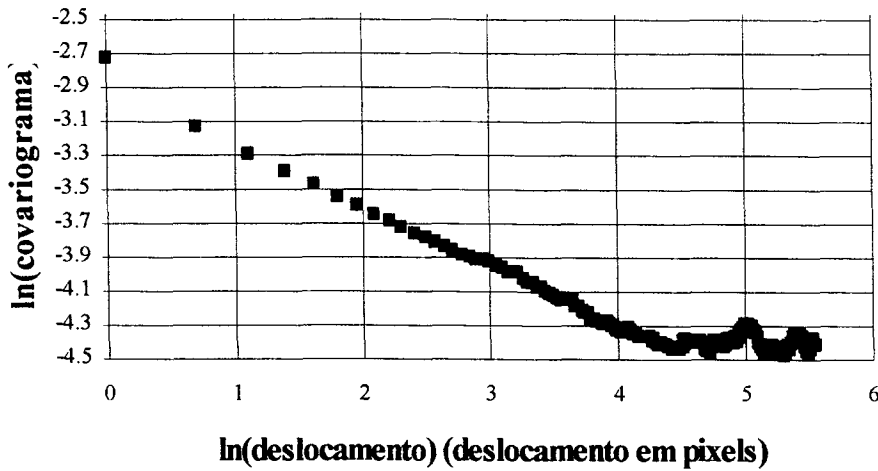


Figura 3.17. A média dos covariogramas na quatro direções para a imagem de 200X.

Agora, da figura 3.17, pode-se melhor observar a parte linear da curva até $\ln(u)=4$, e a dimensão fractal assim calculada assume o valor de 1.648 ± 0.003 com coeficiente 0.998. Quando se efetua a regressão até $\ln(u)=3$, para os resultados da figura 3.17, a dimensão fractal apresenta o valor de 1.662 ± 0.005 com coeficiente de 0.998.

A média das contagens com o método das caixas é apresentada na figura 3.18. Nesse caso, o problema concernente ao nosso método aproximado, para quando as caixas se tornam grandes continua (o que nos parece o comportamento esperado) para valores de $\ln(1/\ell)$ inferiores a -3. A dimensão calculada para a região até $\ln(1/\ell)=-3$ apresenta o valor 1.689 ± 0.019 com coeficiente de 0.9990.

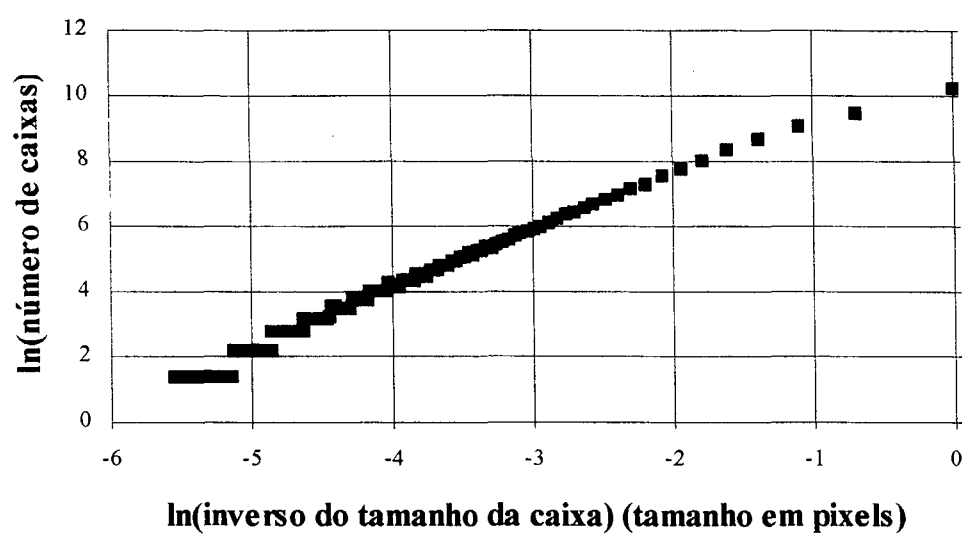


Figura 3.18. Contagem média com método das caixas para as quatro rotações na imagem de aumento de 200X.

3.8.4. Conclusões Sobre os Resultados Obtidos na Escala de Fissuras.

A dimensão fractal obtida com o método das caixas (1.668 ± 0.018) e através da função de covariograma (1.633 ± 0.004), para a imagem de aumento 200X, não apresenta a mesma concordância que aquela da de 3200X. Quando se consideram os valores médios de covariograma e a da contagem das caixas, a dimensão fractal assume os valores de 1.648 ± 0.003 e 1.689 ± 0.019 , respectivamente.

Quanto ao limite de transição de meio heterogêneo para meio homogêneo, dois comprimentos de escala podem ser considerados: os correspondentes a $\ln(u) = 3$ e a $\ln(u) = 4$, os quais fornecem os valores de $25 \mu\text{m}$ e $68 \mu\text{m}$, respectivamente. Nós acreditamos que este limite de transição corresponda a $68 \mu\text{m}$. De fato, utilizou-se para o cálculo do invariante com o método das caixas, a faixa de valores até $\ln(u) = -3$, em função de os resultados se apresentarem mais dispersos de $\ln(u) = -3$ à $\ln(u) = -4$. Contudo, isto é devido, como já dito, ao método das caixas ter sido utilizado de forma aproximada, e provavelmente estes pontos pertençam ao mesmo segmento linear. Isto é reforçado pelo resultados obtidos considerando-se os covariogramas médios, figura 3.17. O comprimento de escala de $68 \mu\text{m}$ está relacionado com o comprimento das fissuras: realmente, uma

observação direta na micrografia de aumento de 200X, nos permite avaliar o comprimento das fissuras como sendo da ordem de $100\mu\text{m}$.

3.9. Considerações Gerais. A Definição da Pasta de Ligantes como um Meio Orbicular.

Na imagem de aumento de 200X, os objetos geométricos predominantes do espaço poroso são as fissuras. Uma fissura é caracterizada geometricamente por apresentar uma relação largura/comprimento baixa — na imagem de aumento de 200X esta razão é da ordem de $2/100 = 0.02$.

Normalmente, a largura de uma fissura é atribuída como sendo o seu diâmetro. Assim é feito, quando se deseja estudar por exemplo, processos de equilíbrio na invasão de fluido não-molhante, ou a permeabilidade de materiais porosos. Se uma fissura isoladamente é submetida à deslocamentos na direção de seu comprimento (largura), ela será correlacionada para deslocamentos até o seu comprimento (largura). A imagem de aumento de 200X, sendo isotrópica apresenta fissuras nas várias direções. Desta forma, para esta imagem, se obteve um comprimento de escala característico de aproximadamente $70\mu\text{m}$, como sendo o limite de transição de meio heterogêneo para homogêneo.

Nós dizemos que a imagem de aumento de 200X é um meio filiforme, no sentido de que os seus maiores poros característicos (as fissuras) têm uma largura de aproximadamente $2\mu\text{m}$, entretanto, o meio é correlacionado até comprimentos de escala bem maiores, da ordem de $70\mu\text{m}$.

Contrariamente, na imagem de aumento de 3200X, os maiores poros apresentam diâmetros em torno de 22000\AA , e o meio é correlacionado para comprimentos de escala de até 12500\AA . O comprimento máximo, até onde o meio é correlacionado denomina-se alcance de correlação, veja-se seção 4.2.1. Assim, a relação diâmetro de poro/alcance de correlação é, para a imagem de aumento de 3200X, bem mais próxima da unidade que para a imagem de aumento de 200X. Isto ocorre, dado que para a pasta de ligantes os poros, diferentemente do que ocorre na escala de fissuras, se aproximam bem mais de círculos, onde o diâmetro corresponde ao alcance de correlação.

Nós dizemos que meios, como o da pasta de ligantes, são orbiculares. O termo orbicular designa meios cujos objetos apresentam a forma de círculos ou esferas. No ramo da petrografia o termo é utilizado para indicar a textura rochosa em que os minerais se dispõem em agrupamentos esferoidais, ou em zonas concêntricas, Holanda Ferreira (1986).

Essas considerações são aqui introduzidas, visto que os meios filiformes e orbiculares apresentarão comportamentos diferentes quando submetidos aos processos de reconstituição, a serem considerados nos capítulos 4 e 5 deste trabalho.

CAPÍTULO 4

RECONSTITUIÇÃO DE ESTRUTURAS POROSAS

4.1. Introdução

A representação geométrica de estruturas porosas, visando por exemplo a simulação de fenômenos de fixação e transferência de umidade, pode ser desenvolvida de várias maneiras. Procura-se conceber um sistema geométrico, que represente a estrutura real do material poroso, simulando o comportamento dos fenômenos físicos. Assim é, por exemplo, com os modelos de redes de sítios e ligações, que tentam representar o espaço poroso, imaginando que os sítios são as cavidades e as ligações as gargantas (estreitamentos entre cavidades). Nesse tipo de modelo, procura-se manter a distribuição de poros e a conectividade do espaço poroso; são geralmente redes não correlacionadas espacialmente, e os fenômenos físicos são estudados sob a ótica da teoria da percolação convencional (construída para sistemas aleatórios). Esses modelos são freqüentemente denominados modelos de percolação baseados em redes randômicas (Neimark, 1989; Adler, 1992). Vários autores se valeram dessa concepção, dentre os quais citam-se: Wall e Brown (1981), Mason (1982, 1988), Parlar e Yortsos (1988), Quenard (1989), Saliba (1990) e Souza (1993).

Menciona-se também a forma de representação através de estruturas fractais, determinísticas ou randômicas, sistemas que em geral, como visto no capítulo 3, apresentam invariância por dilatação.

Este trabalho de tese se apoia na criação de estruturas geométricas artificiais através de processos ditos de reconstituição — ou de reconstrução. Basicamente, a reconstituição consiste em gerar estruturas porosas conservando certos aspectos estatísticos julgados de interesse, medidos na estrutura original do material. Será notado, nos processos aqui utilizados, que eles procuram reproduzir de forma bastante realística a estrutura porosa. Nos sistemas reconstituídos, por vezes muito parecidos, aos olhos do observador, às imagens digitalizadas originais, convivem as duas fases: a matriz sólida e o espaço poroso.

Muito embora os processos de reconstituição criem estruturas bastante realísticas, deve ser ressaltado que o sistema gerado não é verdadeiramente a estrutura original, contudo, vai além da idéia de modelo como o de redes randômicas. De fato, nos modelos usuais de redes de percolação, o sistema não é correlacionado e a conectividade é representada pelo número de coordenação Z , que é o mesmo para toda a rede. Quando se trabalha com processos de reconstituição, procura-se, por exemplo, conservar a porosidade e a função autocorrelação da imagem original, sendo que a configuração geométrica do espaço poroso gerado dá uma conectividade entre os poros, que é intrínseca ao processo, de tal forma a satisfazer a porosidade e a autocorrelação.

Os processos de reconstituição são importantes, uma vez que com a hipótese de isotropia, permitem operar uma transformação de estruturas bidimensionais em tridimensionais (com uma melhor representação da conectividade do espaço poroso), possibilitando em certos casos um tratamento matemático relativamente simples nas simulações de fenômenos físicos.

Quando se pensa na reconstituição de uma estrutura porosa, o que nos parece fundamental, é a definição dos aspectos estatísticos que são relevantes para a dada configuração geométrica da estrutura original. Certamente pode-se propor vários métodos conjugados às variáveis estatísticas que se quer conservar no processo. Materiais estatisticamente homogêneos podem ser representados pelos momentos de ordem n da função de fase (definida pela equação 2.1.) (Adler, 1992). Joshi (1974), citado nos trabalhos de Quiblier (1984) e Adler et alii (1990), propõe a reconstituição baseada no conhecimento dos dois primeiros momentos da função de fase: a porosidade e a função autocorrelação, como definidos anteriormente. A idéia de Joshi consiste na criação de um campo randômico que satisfaça os dois primeiros momentos a partir de um campo gaussiano normal e não correlacionado.

Neste capítulo apresenta-se o método de reconstituição originalmente concebido por Joshi (1974) visando a geração de sistemas bidimensionais. Segue-se aqui os trabalhos de Quiblier (1984) e Adler et alii (1990) que estenderam a idéia para reconstituições tridimensionais. O algoritmo computacional associado ao método é aqui implementado e são feitas as reconstituições das imagens da argamassa.

No capítulo seguinte trabalha-se com a idéia de reconstituição em sistemas multiescalas, como concebida por Neimark (1989) e Daian (1992a, 1992b). Estes sistemas se apresentam potencialmente poderosos para a descrição de estruturas porosas como a argamassa, que apresentam uma distribuição de poros bastante larga.

4.2. Método de Reconstituição de Joshi

Pretende-se aqui a criação de um campo randômico discreto assumindo valores 0 e 1, representado em uma malha quadrada ou cúbica, que satisfaça os parâmetros de porosidade ε e autocorrelação, $R_{pp}(u)$, como definidos na seção 2.4., medidos em uma estrutura porosa original. Como já dito, as medições de ε e $R_{pp}(u)$ são realizadas sobre imagens digitalizadas bidimensionais, onde são assumidas, *a priori*, as hipóteses de homogeneidade e isotropia estatísticas das estruturas.

Este processo de reconstituição pode ser assim sumarizado:

- i) Na imagem bidimensional original mede-se a porosidade ε e a autocorrelação agora com notação $R_{pp}^P(u)$;
- ii) O meio reconstituído será composto de células elementares representando matriz sólida ou espaço poroso;
- iii) O processo se inicia com a ocupação das células elementares por uma população gaussiana $X(\mathbf{x})$ que é normal (média 0 e variância 1) e não correlacionada;
- iv) Uma combinação linear das variáveis $X(\mathbf{x})$ — pelo denominado filtro linear — fornece uma população $Y(\mathbf{x})$ que é ainda gaussiana normal porém já é correlacionada, com autocorrelação $R_{pp}^Y(u)$;
- v) A população $Y(\mathbf{x})$ é transformada — por um filtro não linear — em uma população discreta $P(\mathbf{x})$ que assume os valores 0 (fase sólida) e 1 (espaço poroso). De fato, a autocorrelação de $Y(\mathbf{x})$ é modificada pelo filtro linear de maneira a se recuperar a autocorrelação desejada de $P(\mathbf{x})$, $R_{pp}^P(u)$; a média de $P(\mathbf{x})$ será automaticamente igual à porosidade ε .

A seguir, apresenta-se de forma sucinta, os passos associados ao método de reconstituição de Joshi.

4.2.1. Filtro Linear

Considere-se inicialmente um domínio cúbico $\vartheta = [0, N_c]^3$, discretizado em N_c^3 células elementares onde será disposto um campo randômico $X(\mathbf{x})$ com $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Os valores $X(x_1, x_2, x_3)$ devem obedecer uma distribuição normal e serem independentes. Para cada ponto (x_1, x_2, x_3) constrói-se uma vizinhança composta dos pontos $(x_1 + r, x_2 + s, x_3 + t)$, onde as variáveis r, s e t assumem os valores $0, 1, 2, \dots$ até um limite L_c , expresso em múltiplos da célula elementar (o pixel), além do qual a autocorrelação $R_{pp}^p(u)$ se torna negligenciável (assumindo valores em torno de zero). Introduce-se também um parâmetro τ denominado alcance de correlação, que corresponde ao deslocamento tal que a correlação se torna negligenciável. Deve ser notado que quando se consideram deslocamentos de uma célula elementar, o parâmetro L_c se iguala a τ .

Define-se agora um operador linear dado por um conjunto de coeficientes $a(r, s, t)$. As variáveis $X(x_1 + r, x_2 + s, x_3 + t)$ são combinadas linearmente fornecendo um novo campo randômico $Y(x_1, x_2, x_3)$:

$$Y(x_1, x_2, x_3) = \sum_{\substack{r, s, t \\ \in [0, L_c]}} a(r, s, t) X(x_1 + r, x_2 + s, x_3 + t) \quad (4.1.)$$

Assume-se que além do domínio $[0, L_c]^3$ os coeficientes $a(r, s, t)$ são nulos.

O campo Y é correlacionado. De fato, quando se consideram dois pontos de ϑ suficientemente próximos, por exemplo $X(x_1, x_2, x_3)$ e $X(x_1 + 1, x_2 + 2, x_3)$, os domínios de atuação do filtro linear em cada um dos dois pontos — que consistirá dos conjuntos de pontos $X(x_1 + r, x_2 + s, x_3 + t)$ e $X(x_1 + 1 + r, x_2 + 2 + s, x_3 + t)$, respectivamente — devem apresentar uma intersecção não nula. Dessa forma, pontos pertencentes a essa intersecção participam na combinação linear que fornecerá $Y(x_1, x_2, x_3)$ e $Y(x_1 + 1, x_2 + 2, x_3)$. Ora, a presença de um mesmo elemento, na combinação dos outros dois cria uma ligação entre eles.

Pode ser demonstrado (Quiblier, 1984; Adler et alii, 1990), que o campo Y é também gaussiano normal, porém com autocorrelação dada por:

$$R_{pp}^Y(u) = \sum_{\substack{r,s,t \\ \in [0,L_c]}} a(r,s,t)a(r+u,s,t) \quad (4.2.)$$

4.2.2. Filtro Não Linear

Na operação anterior obteve-se a partir do campo gaussiano independente $X(\mathbf{x})$ um campo $Y(\mathbf{x})$ também gaussiano porém correlacionado. O campo $Y(\mathbf{x})$ assume valores reais e deseja-se um campo $P(\mathbf{x})$ que assumira os valores discretos 0 e 1. Além disso, a autocorrelação de $Y(\mathbf{x})$ ainda não é a desejada e uma transformação denominada filtro não linear é operada sobre $Y(\mathbf{x})$. O campo $Y(\mathbf{x})$ é gaussiano normal e seja $F_Y(y)$ sua função distribuição:

$$F_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^y e^{-\frac{y^2}{2}} dy \quad (4.3.)$$

Define-se um operador G dado por:

$$P(\mathbf{x}) = G(Y(\mathbf{x})) \quad (4.4.)$$

transformando o campo Y em P , da seguinte forma:

$$P(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{quando } F_Y(y) \leq \varepsilon \\ 0, & \text{quando } F_Y(y) > \varepsilon \end{cases} \quad (4.5.)$$

Claramente, tem-se que $\langle P(\mathbf{x}) \rangle$ é igual a ε .

Resta agora relacionar a autocorrelação do campo P com a do campo Y . Isto pode ser feito em termos de uma série (Adler et alii, 1990) :

$$R_{pp}^P(u) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^2 [R_{pp}^Y(u)]^m \quad (4.6.)$$

Onde os coeficientes C_m são dados por:

$$C_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi m!}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(y) \exp\left(\frac{-y^2}{2}\right) H_m(y) dy \quad (4.7.)$$

Com os polinômios de Hermite $H_m(y)$ e o parâmetro $c(y)$ dados por:

$$H_m(y) = (-1)^m \exp\left(\frac{y^2}{2}\right) \frac{d^m}{dy} \exp\left(\frac{-y^2}{2}\right) \quad (4.8.)$$

$$c(y) = \begin{cases} \frac{\varepsilon - 1}{\sqrt{\varepsilon(1 - \varepsilon)}} & \text{se } F_Y(y) \leq \varepsilon \\ \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon(1 - \varepsilon)}} & \text{se } F_Y(y) > \varepsilon \end{cases} \quad (4.9.)$$

4.2.3. Resolução do Problema Inverso

Conforme já dito, os parâmetros conhecidos para a reconstituição são a porosidade ε e a autocorrelação $R_{pp}^P(u)$ da imagem original. Assim, para se proceder a simulação da estrutura porosa deve-se inicialmente resolver o problema inverso, com o intuito de se determinar a autocorrelação $R_{pp}^Y(u)$ e em seguida o conjunto de coeficientes $a(r, s, t)$.

A relação entre as autocorrelações dos campos Y e P para cada porosidade ε , foi obtida numericamente com base na equação (4.6.). A integral da equação (4.7.) foi avaliada na faixa de valores de -10 a 10 como em Quiblier (1984) e Adler et alii (1990). Realmente, a adoção de uma faixa de valores mais extensa não apresenta influência sobre os resultados finais. A série definida pela equação (4.6.) foi limitada em 35 termos — Quiblier (1984) utilizou 12 termos e Adler et alii (1990) 50 termos — não sendo utilizado um número superior devido a problemas computacionais.

Na figura 4.1 apresentam-se os resultados obtidos de $R_{pp}^P = R_{pp}^P(R_{pp}^Y, \varepsilon)$ para alguns valores de porosidade.

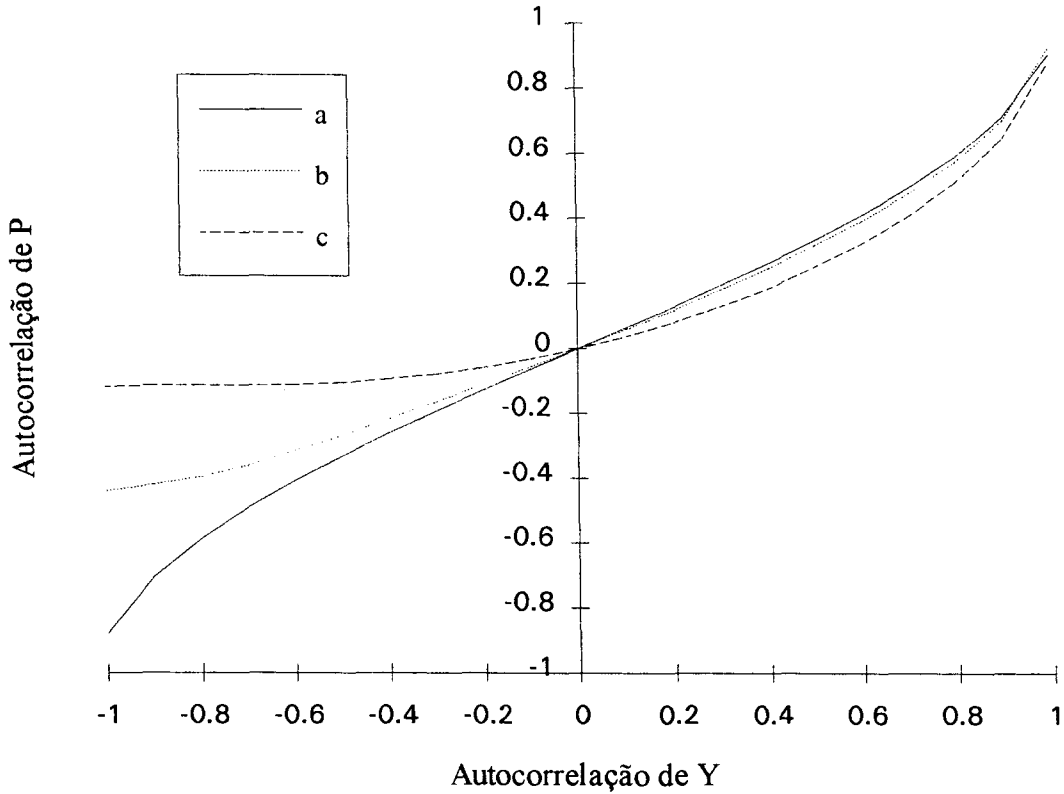


Figura 4.1. A função $R_{pp}^P = R_{pp}^P(R_{pp}^Y, \varepsilon)$. As curvas a, b, c, se referem às porosidade de valores 0.47, 0.30, e 0.11, respectivamente.

Uma vez de posse de R_{pp}^Y pode-se proceder a determinação dos coeficientes $a(r,s,t)$, considerando-se o sistema de equações definido em (4.2.). Este sistema conduz a um número $(L_c + 1)^3$ de equações e incógnitas; Quiblier (1984) o resolveu diretamente. Assumindo, contudo, a hipótese de isotropia, pode-se fazer como Adler (1990), reduzindo consideravelmente os coeficientes a se determinar. De fato, quando se considera um meio poroso isotrópico, os coeficientes $a(r,s,t)$ devem ser função apenas da distância $d = \sqrt{r^2 + s^2 + t^2}$, e escreve-se:

$$a(r, s, t) = a(\sqrt{r^2 + s^2 + t^2}) \quad (4.10.)$$

Assim fazendo, o sistema de equações definido em (4.2.) se apresenta como:

$$R_{pp}^Y(u) = \sum_{\substack{r,s,t \\ \in [0, L_c]}} a(\sqrt{r^2 + s^2 + t^2}) a(\sqrt{(r+u)^2 + s^2 + t^2}) \quad (4.11.)$$

onde u assume valores de 0 até L_c .

Trabalha-se então com a função $a(d)$ nos $L_c + 1$ pontos: $a(0)$, $a(1)$, ... $a(L_c)$; os pontos localizados no interior são avaliados através de um esquema de interpolação. O sistema (4.11.), sistema este não-linear, foi resolvido através de um algoritmo implementado por Nash (1989). O método utilizado neste algoritmo consiste em se definir uma função mestre que é a soma dos quadrados das $L_c + 1$ equações. Em seguida avalia-se por um método de quasi-Newton, um mínimo da função mestre, que deverá corresponder (o que é verificado *a posteriori*) a uma solução do sistema.

4.3. Reconstituição da Estrutura da Pasta de Ligantes e da Escala de Fissuras

4.3.1. Pasta de Ligantes

Do exposto acima, uma vez que se conheça o conjunto de coeficientes $a(d)$, o processo de reconstituição é efetuado a partir do campo gaussiano não correlacionado.

Do ponto de vista prático, considera-se alguns parâmetros de entrada, a saber:

- i) o tamanho linear N_c do domínio de trabalho, seja ele um quadrado ou um cubo;
- ii) o número total L_c de pontos experimentais que descrevem a função autocorrelação $R_{pp}^P(u)$;
- iii) a distância u entre dois pontos experimentais de correlação, ou seja, o deslocamento elementar considerado.

A partir de uma imagem bidimensional 2D serão realizadas reconstituições, gerando estruturas 2D e 3D. Proceda-se inicialmente a reconstituição 2D com dois objetivos: a observação visual do meio gerado e a caracterização estatística da função distribuição de poros

(além é claro da porosidade e da autocorrelação). Depois, procede-se a reconstituição em estruturas 3D medindo-se a porosidade e a autocorrelação do domínio cúbico bem como de seções do cubo. A obtenção da distribuição de poros para a estrutura 3D com a operação de abertura, que aqui não foi realizada, necessita de uma reformulação das métricas para o espaço métrico tridimensional.

Quando se considera o parâmetro N_c , procura-se um tamanho de rede que forneça um sistema estatisticamente representativo, e pode-se dizer *a priori* que quanto maior o valor de N_c tanto melhor. Contudo, aqui se esbarra em problemas computacionais e procura-se então um valor de N_c a partir do qual e para valores superiores, o comportamento estatístico do sistema gerado não apresente variações apreciáveis. Deve ser notado que nos processos de geração de sistemas aleatórios, tem-se representatividade estatística para tamanhos de rede menores quando comparado com sistemas correlacionados. De fato, em sistemas aleatórios o tamanho da rede deve ser relacionado a uma célula elementar de rede (pois o alcance da correlação é nulo) enquanto que para sistemas correlacionados o tamanho de rede representativa se relacionará com o parâmetro τ que descreve o alcance da correlação (Mayagoitia, 1989a, 1989b; Magnani, 1994). De outra forma, considerando-se por exemplo redes quadradas, em sistemas correlacionados tem-se ciclos de τ^2 células elementares e para sistemas aleatórios os ciclos são de uma célula, o número total de ciclos devendo fornecer redes representativas.

O número total de pontos experimentais da função correlação a ser tomado, $L_c + 1$, está como dito anteriormente associado ao deslocamento, tal que a correlação seja negligenciável. Assim, para a imagem de aumento 3200X a correlação se aproxima do valor nulo para deslocamentos em torno de 16-18 pixel, ou 10000-11250Å.

Ainda, no que toca à reconstituição é usual tomar-se os valores experimentais de correlação para deslocamentos múltiplos do pixel. Isto é feito principalmente para imagens com grande alcance de correlação τ , no intuito de se diminuir o número de equações a serem resolvidas no filtro linear.

Para exemplificar, tome-se o caso da imagem de 3200X, onde τ assume o valor de 16 pixels. Quando se consideram deslocamentos pixel a pixel tem-se no filtro linear um total de 17

equações a resolver enquanto que tomando deslocamentos de 2 pixels tem-se 9 equações. Além disso, com deslocamentos de 2 pixels, o processo de geração se torna bem mais rápido, uma vez que se diminui consideravelmente o número de coeficientes $a(d)$ na combinação linear das variáveis do campo gaussiano não correlacionado. Do ponto de vista da imagem gerada, é como se tivesse realizado uma "reamostragem" na imagem original: o tamanho do pixel na imagem gerada será proporcional ao múltiplo do deslocamento adotado. Exemplificando novamente para a imagem de 3200X onde o pixel equivale a 625Å: considerando-se pontos experimentais de correlação a cada dois pixels o tamanho do pixel na imagem gerada será de 1250Å.

Para a imagem de aumento de 3200X os exemplos dados acima foram de fato utilizados no processo de reconstituição: adotou-se τ igual a 16 pixels e tomaram-se os valores de correlação a cada dois pixels o que conduz a um valor de L_c igual a 8. Para a reconstituição em estruturas 2D, utilizaram-se redes de 220x220 pixels, tamanho assim limitado por razões computacionais, contudo, como se verá adiante, os parâmetros medidos na imagem gerada apresentam pequena variação estatística. Para esse tamanho de rede o tempo de processamento necessário foi de aproximadamente cinco minutos, utilizando-se um microcomputador 486 da linha PC (com coprocessador matemático e operando na frequência de 33 MHz). Quanto ao gerador de números pseudo-aleatórios, este trabalho sempre utiliza uma rotina que é descrita em Press et alii (1989); desses mesmos autores também se utiliza o gerador de população gaussiana normal não correlacionada.

Na tabela 4.1. mostram-se os valores de entrada de correlação R_{pp}^Y — obtidos a partir de R_{pp}^P resolvendo-se o problema inverso como descrito anteriormente — no filtro linear bem como os valores de correlação calculados, considerando-se a solução do sistema de equações para o conjunto de coeficientes $a(d)$. Pode ser notado que os resíduos são relativamente pequenos, o que é importante uma vez que a qualidade da imagem gerada depende fortemente desses coeficientes.

A imagem reconstituída para a pasta de ligantes pode ser observada na figura 4.2. Verifica-se que o seu aspecto visual é bastante parecido com a imagem original (o que de fato é uma observação subjetiva). Esta questão será discutida mais adiante neste capítulo na seção 4.4.

Tabela 4.1 Solução do Filtro Linear para a Imagem de 3200X.

d	a(d)	Correlação Entrada	Correlação Calculada	resíduo
0	0.2491	1	1.0157	0.0157
1	0.1499	0.8419	0.8204	-0.0215
2	0.053	0.6105	0.6138	0.0033
3	0.0391	0.4432	0.4455	0.0023
4	0.0843	0.3249	0.322	-0.0029
5	0.1324	0.2393	0.2431	0.0038
6	0.1686	0.1637	0.1685	0.0048
7	0.1547	0.1052	0.0915	-0.0137
8	0.1156	0.0613	0.0288	-0.0325

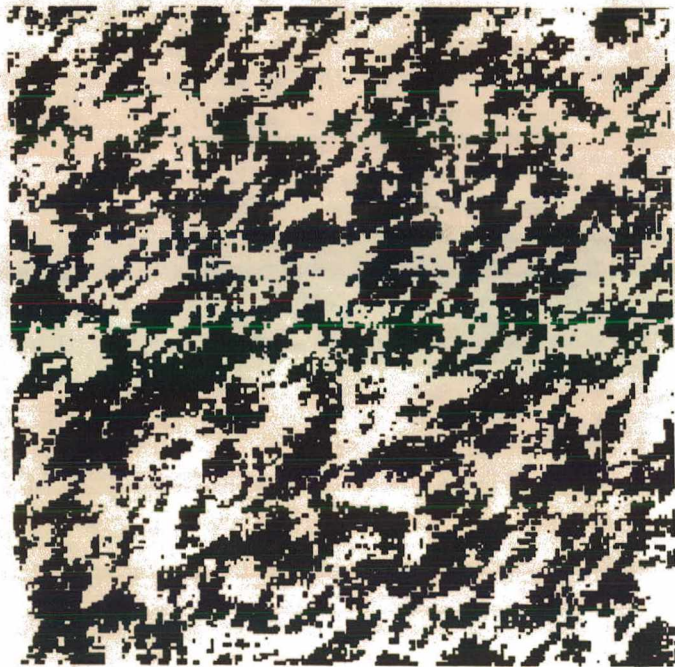


Figura 4.2. A imagem reconstituída para a pasta de ligantes. O pixel vale 1250Å.

Na figura 4.3 mostram-se os resultados de covariograma da imagem reconstituída (para uma dada semente do gerador randômico) em comparação com o covariograma da imagem original de aumento 3200X. A porosidade original apresenta o valor 0.4714 e a gerada 0.4795.

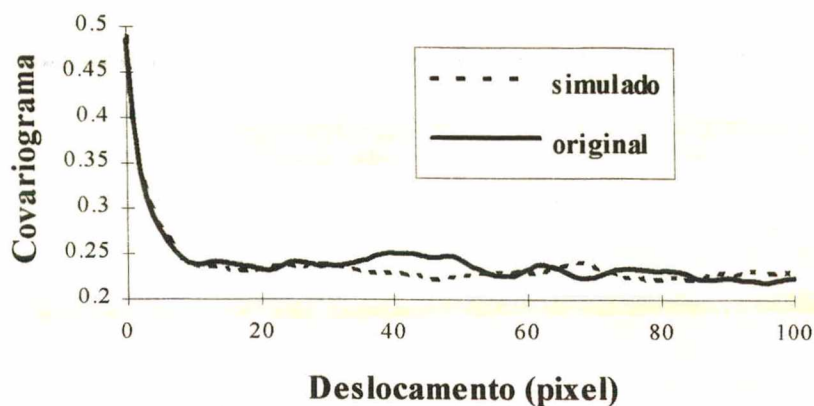


Figura 4.3. Comparação dos covariogramas das imagens de 3200X e reconstituída 2D pelo método Joshi; os valores de covariograma para deslocamento nulo são de 0.4863 e 0.4784, respectivamente.

Para a imagem reconstituída mostrada na figura 4.2, avaliou-se a função distribuição de volume de poros com a operação de abertura, e os resultados são apresentados na figura 4.4 em comparação com aqueles obtidos para a imagem original. Nota-se uma concordância bastante boa, o que será discutido adiante.

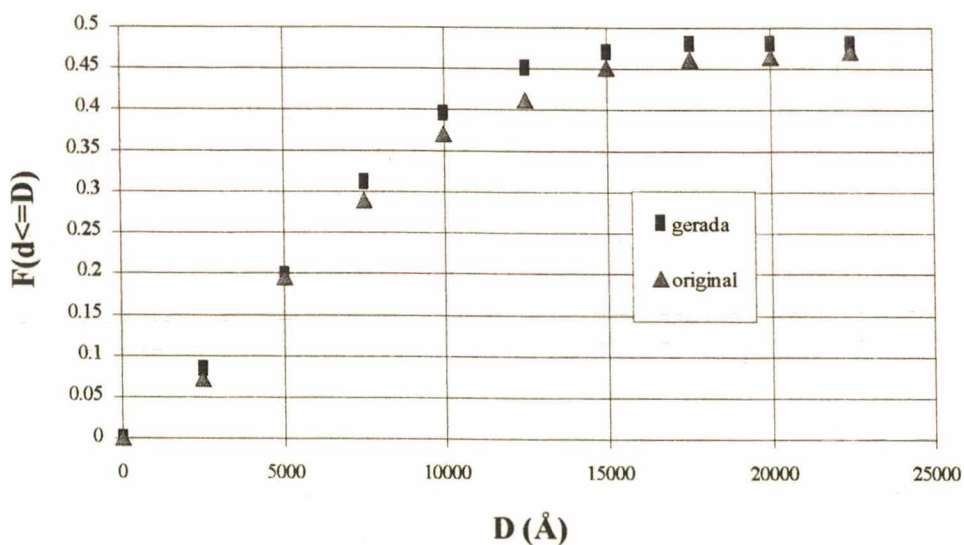


Figura 4.4. As distribuições acumuladas de poros para a imagem de 3200X e sua reconstituída pelo método Joshi.

A influência do gerador randômico sobre o processo de reconstituição pode ser observada na figura 4.5, onde são mostrados os resultados para seis gerações com sementes diferentes.

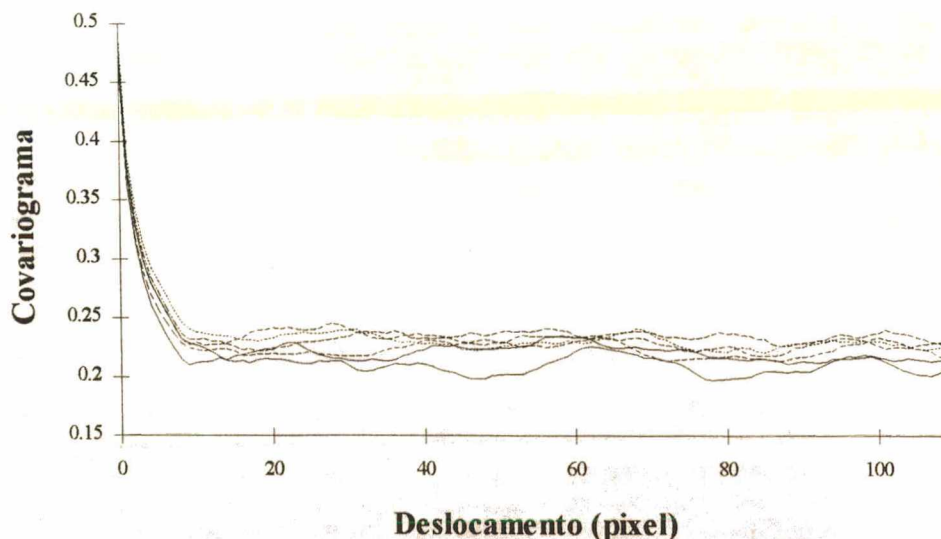


Figura 4.5. A influência do gerador randômico sobre o processo de reconstituição.

Em seguida resolveu-se o sistema de equações para o filtro linear visando reconstituições em estruturas 3D. Informa-se aqui que os resíduos encontrados apresentam as mesmas ordens de grandeza que aqueles obtidos para a solução com o filtro linear 2D.

Adler et alii (1990) realizaram reconstituições para imagens de arenitos de Fontainebleau com porosidades variando de 0.11 a 0.31 utilizando redes cúbicas de no máximo $27 \times 27 \times 27$ células. Esse tamanho de rede forneceu resultados médios (considerando-se várias gerações) de porosidade total e covariograma do domínio cúbico concordando bastante bem com os seus valores experimentais. O presente trabalho encontra da mesma forma, boa concordância dos parâmetros estatísticos medidos no cubo e originais quando se utilizam redes de aproximadamente o mesmo tamanho que as de Adler et alii (1990). Contudo, uma análise dos parâmetros de porosidade e autocorrelação em planos seccionados do cubo demonstra uma dispersão bastante grande dos resultados quando comparados com as médias da rede cúbica. Isto deve significar, para o caso da imagem de aumento de 3200X do presente trabalho que redes, por exemplo, de $30 \times 30 \times 30$ pixels são suficientes para descrever as médias no cubo,

entretanto os planos de 30x30 pixels são de fato pequenos quando comparado com o alcance de correlação (da ordem de 16 pixels para a imagem de 3200X). No trabalho de Adler et alli (1990) não são apresentadas de forma sistemática estatísticas das seções contudo seus tamanhos de rede podem ser suficientes para as imagens com alcance de correlação pequeno.

Realizou-se então a reconstituição da imagem de 3200X com redes de 60x60x60 (tamanho assim limitado por razões computacionais) notando-se uma sensível melhora na estatística por seções. Para esse tamanho de rede o tempo de processamento necessário foi de aproximadamente quarenta e dois minutos, utilizando-se um microcomputador 486 da linha PC (com coprocessador matemático e operando na frequência de 33 MHz). Na figura 4.6 mostra-se o covariograma obtido para o domínio cúbico em comparação com o experimental; a porosidade gerada apresenta o valor de 0.4860, para a dada semente do gerador utilizada.

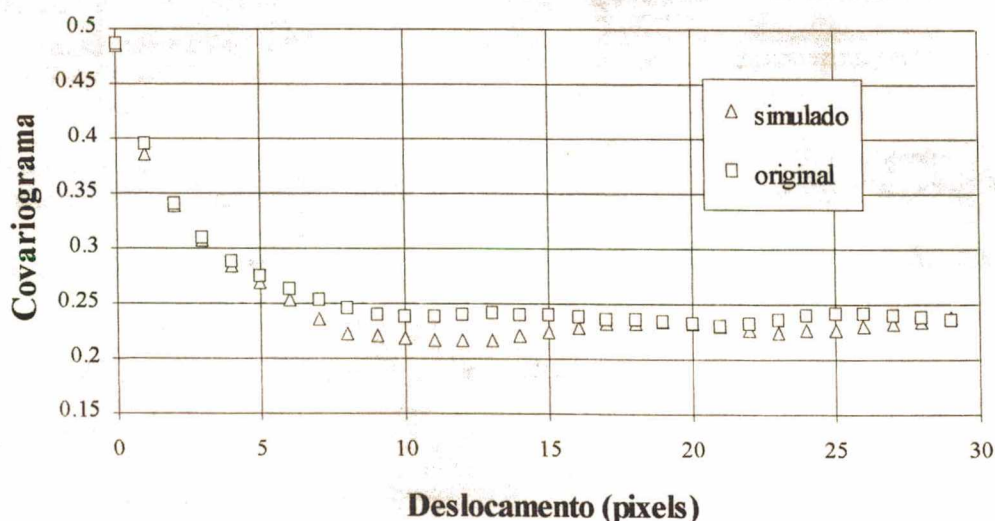


Figura 4.6. Comparação dos covariogramas das imagens de 3200X e reconstituída 3D pelo método Joshi; os valores de covariograma para deslocamento nulo são de 0.4863 e 0.4853 respectivamente.

Os valores de porosidade para 60 seções do cubo em comparação com a porosidade original podem ser vistos na figura 4.7. Nessas seções o valor mínimo de porosidade encontrado foi de 0.4208 e o máximo de 0.5311.

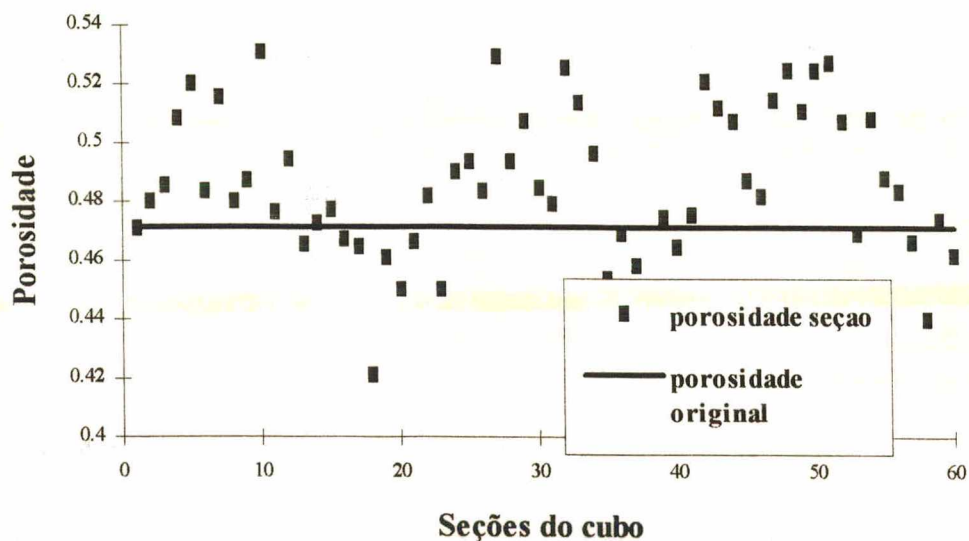


Figura 4.7. Variação da porosidade por seções na imagem reconstituída 3D para a pasta de ligantes.

Na figura 4.8 são mostrados os covariogramas obtidos para várias seções do cubo reconstituído da imagem de 3200X em comparação com o experimental. Naturalmente nas seções com porosidades bastante diferentes da original o covariograma geralmente também o será.

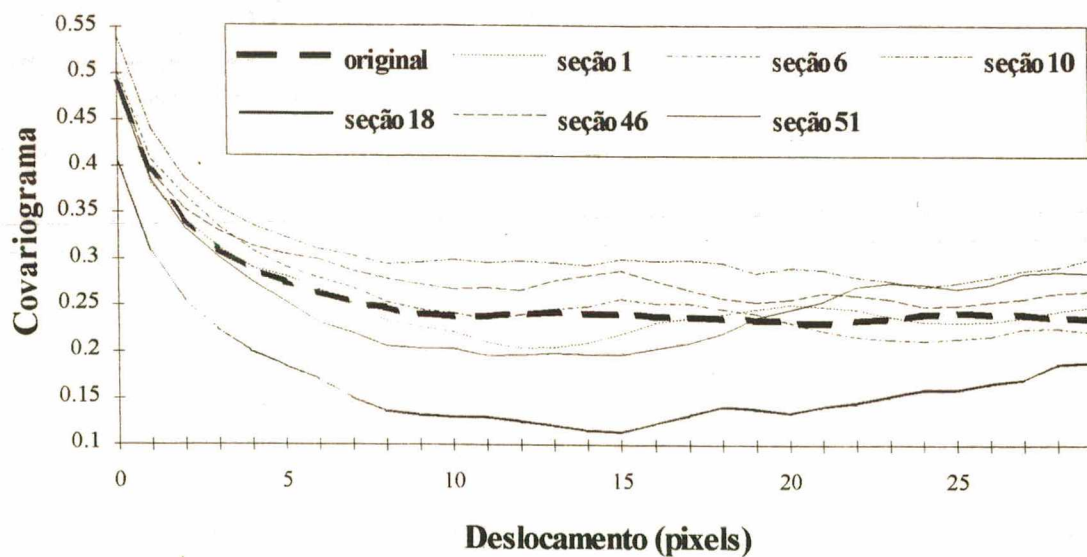


Figura 4.8. Os covariogramas para várias seções do cubo gerado.

Certamente a utilização de redes maiores conduzirá a uma melhor estatística dos parâmetros nas seções do domínio cúbico.

4.3.2 Escala de Fissuras

Para a imagem de 200X procedeu-se a reconstituição 2D a partir dos valores de correlação médios obtidos considerando-se as quatro rotações da imagem, como descrito no capítulo anterior. E assim foi feito uma vez que as correlações médias para este caso sempre decaem quando se aumenta o deslocamento, o que não ocorre para a correlação avaliada apenas na direção x para a imagem original de 200X, que para deslocamentos grandes e quando se aumenta o deslocamento por vezes fornece uma correlação superior ao deslocamento anterior. Consideraram-se valores de correlação a cada 3 pixels e adotou-se L_c igual a 16.

Na figura 4.9 mostra-se o aspecto da imagem assim reconstituída em uma rede de 300x300 pixels; a porosidade gerada é de 0.1057.

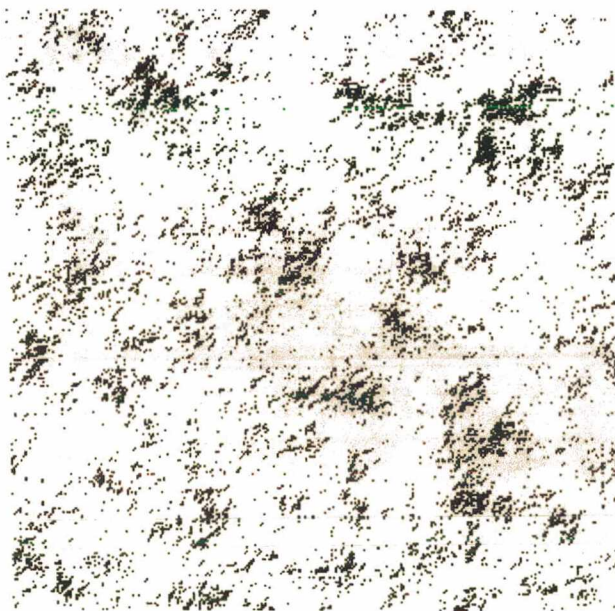


Figura 4.9. A imagem reconstituída para o complexo de fissuras. O pixel equivale a $3.75\mu\text{m}$.

Em seguida efetuou-se mais duas gerações (variando-se a semente do gerador) e os covariogramas obtidos são apresentados na figura 4.10.

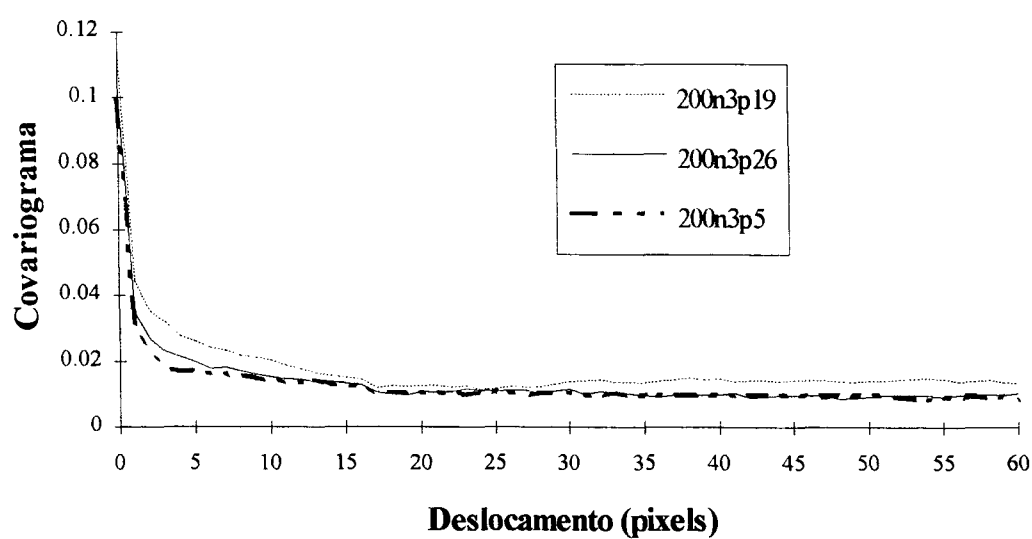


Figura 4.10. Os covariogramas para 3 gerações da imagem associada ao aumento de 200X.

Uma comparação da média dos covariogramas das três gerações com o covariograma médio original pode ser visto na figura 4.11.

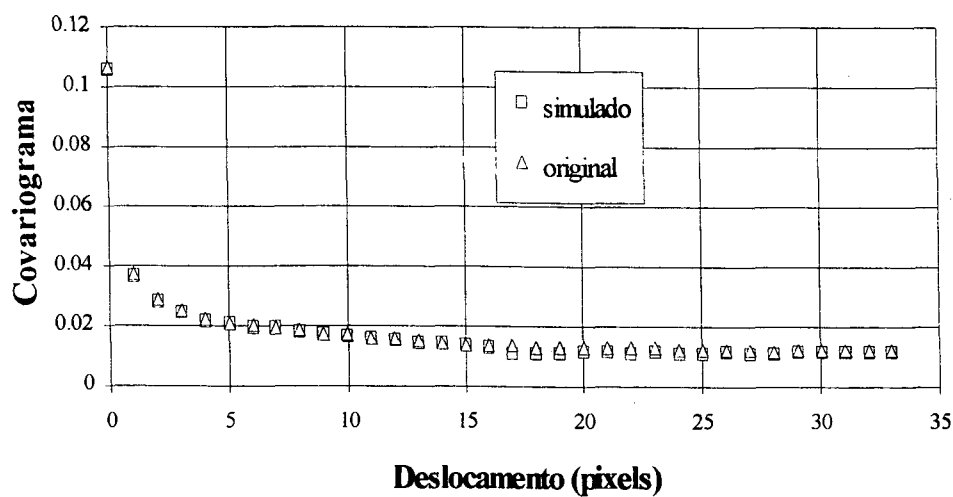


Figura 4.11. Comparação das médias dos covariogramas medidos e gerados. Imagem de 200X.

Na figura 4.12 mostra-se a comparação das distribuições de volumes de poros entre a imagem original e a simulada, figura 4.9.

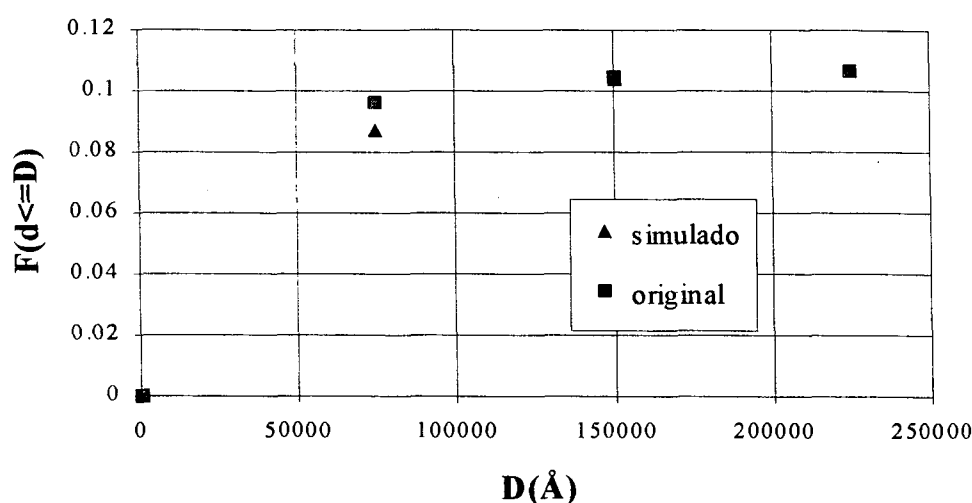


Figura 4.12. As distribuições de volumes de poros original e gerada para a imagem de aumento de 200X.

4.4. Considerações Gerais

O método de reconstituição de Joshi, trabalha bem no tocante à reprodução da porosidade e da função autocorrelação. Em sua aplicação o que nos parece fundamental é a qualidade da solução do sistema de equações do filtro linear.

Para a imagem da pasta de ligantes, comentou-se anteriormente que a reconstituição 2D conduz a uma imagem de aspecto visual bastante parecido (o que de fato é uma observação bastante subjetiva) à imagem original. Numa apreciação preliminar nós atribuímos este fato ao caráter fractal da imagem de 3200X, como visto no capítulo anterior. Ora, uma vez que a imagem reconstituída conserva o covariograma da original, elas apresentarão a mesma dimensão fractal, o que nesse caso implicaria na autosimilaridade.

Esta observação parece falhar quando se considera a imagem reconstituída de 200X, muito embora o covariograma seja conservado. De fato, o aspecto visual da imagem gerada difere da original, ainda que, se possa, com boa vontade, notar o aspecto do que seriam os grãos de areia (zonas brancas na imagem da figura 4.9) e em torno desses supostos grãos, objetos estendidos que seriam fissuras. Deve-se levar em conta nesta observação visual que se tomou a correlação a cada três pixels, e que esta "reamostragem" pode ser grande.

A reconstituição de imagens de meios filiformes, como a de aumento de 200X, pode ser mais complicada: eventualmente seria necessária a consideração de mais momentos da função de fase, para que se reproduzisse objetos com o mesmo aspecto visual das fissuras. A reconstituição levando-se em conta apenas os dois primeiros momentos da função de fase, parece, por outro lado, ser suficiente para meios orbiculares, como a pasta de ligantes. Nesse caso, são conservadas as informações de porosidade, da função autocorrelação e a distribuição de volumes de poros, bem como o aspecto visual. Como dito anteriormente, as informações de conectividade são intrinsecamente carregadas no processo de reconstituição. Seria interessante, um estudo adicional de forma a se comparar a conectividade do meio original e do reconstituído. Isto poderia ser desenvolvido a partir da informação da distribuição de gargantas em número (com o uso da técnica de erosão como descrita na seção 2.7.) ou através da técnica do gráfico da linha mediana (Montanvert, 1987; Chassery e Montanvert, 1991; Pieritz, 1994).

No que toca à boa concordância da distribuição acumulada de volumes de poros (especialmente para a imagem de 3200X e sua reconstituída) insinua-se uma possível amarração entre a distribuição e a correlação — não sabemos sob quais condições.

Como visto no capítulo anterior, para a pasta de ligante, $C_{pp}(r) \propto r^{-\alpha}$ e $V_p(r) \propto r^{-\alpha}$. Desta maneira, o invariante α em mudança de escala, denotaria a amarração entre a distribuição e a correlação. Evidentemente essas considerações necessitam de fundamentação teórica.

Algun comentário é também feito, com o intuito de se considerar as imagens reconstituídas pelo método de Joshi em 3D, objetivando-se a simulação de fenômenos físicos, como por exemplo a invasão de fluido não molhante (mercúrio, ou ar em processos de dessorção de água). Como já dito, para esses fenômenos a distribuição de poros (cavidades e gargantas) e a conectividade desempenham papel fundamental. Essas imagens reconstituídas se apresentam como as originais, necessitando ainda uma descrição dos objetos e da conectividade. Ao nosso conhecimento, três maneiras podem ser utilizadas para a solução deste problema.

Uma primeira consiste na obtenção da descrição dos poros em cavidades e gargantas e da conectividade pela técnica do gráfico da linha mediana, que envolve conceitos bastante novos, e que vem sendo estudada por Pieritz (1994). Esta técnica tem sido implementada para imagens bidimensionais, sendo necessária uma reformulação para imagens tridimensionais.

Uma segunda maneira, seria a representação das imagens reconstituídas em 3D por meio do código de árvore octonária (a análoga da árvore quaternária em 3D). Essa representação permite a distinção dos objetos da imagem em cavidades e gargantas, bem como a descrição da conectividade.

A outra maneira — utilizada por Quenard (1992) em imagens 2D e que vem sendo estudada por Magnani (1994) para estruturas 3D — consiste em realizar a simulação da invasão de fluido não molhante através da operação de abertura. Nesta idéia, parte-se de um elemento estruturante de tamanho superior ao dos maiores poros da imagem, diminuindo-se progressivamente o seu tamanho até o dos menores poros. Para cada passo da operação de abertura, restam na imagem apenas os poros possíveis de serem invadidos (condição de diâmetro) e é testada a conectividade com a fase de fluido não molhante, para a invasão efetiva dos poros.

CAPÍTULO 5

SISTEMAS MULTIESCALAS

5.1. Introdução

Geralmente os modelos de estrutura baseados em redes randômicas de percolação são constituídos de uma única escala, ou nas palavras de Neimark (1989), são modelos monodispersos consistindo de elementos primários de um dado tamanho característico.

Por outro lado, os modelos baseados em estruturas fractais, como por exemplo os tapetes de Sierpinski, são constituídos por várias escalas, onde no limite de construção a porosidade tende a 0 ou a 1.

Provavelmente, e este é o pensamento deste trabalho, a concepção de modelos de estruturas multiescalas advém da idéia natural de que eles se apresentam bastante adequados para descrever materiais com distribuição de poros larga.

Nos modelos de redes de percolação randômica, cada elemento (sítio ou ligação) apresenta um tamanho característico convivendo em um sistema que é visto como uma única escala. Nesses modelos, a conectividade (aqui traduzida pelo número de coordenação Z) pode ser constante em toda a rede, como $Z=4$ para redes quadradas, ou espacialmente variável. Nas estruturas multiescalas, cada escala é composta por elementos de um mesmo tamanho e a composição das escalas conduz intrinsecamente a uma dada distribuição de poros e conectividade.

Ressalta-se também, que os modelos multiescalas permitem obter a solução de problemas de invasão de fluido não-molhante de maneira relativamente fácil. Isto advém do fato que se conhece as frações de volumes de poros para cada escala em separado e a informação de conectividade é intrínseca ao sistema, isto é, não se torna necessária a descrição dos objetos da estrutura distribuídos separadamente em cavidades e gargantas.

Neste capítulo, apresenta-se inicialmente a base do modelo multiescala como idealizado por Neimark (1989) que ao nosso conhecimento foi o primeiro autor a divulgá-la. Neimark propõe uma estrutura cuja construção é uma simbiose de modelos fractal e de percolação, estrutura esta

com uma porosidade arbitrária. Para a dada estrutura, ele avalia analiticamente características estatísticas como porosidade, superfície específica, distribuição de poros e dimensão fractal.

Inspirado no modelo de Neimark, Daian (1992a,1992b) propõe uma variação na construção do sistema multiescala (SME), objetivando a descrição da microestrutura de materiais com distribuição de volumes de poros larga.

O modelo proposto por Daian consiste em gerar o SME, conhecendo-se a fração de volume de cada classe de poro, que é distribuída aleatoriamente em sua respectiva escala.

Os modelos de SME, de Neimark (1989) e de Daian (1992a,1992b), são em essência processos de reconstituição (reconstrução) da estrutura de materiais porosos. Nesse caso, os parâmetros estatísticos fundamentais que alimentarão o processo de reconstituição, são as distribuições de volumes de poros e de sólido para o modelo de Neimark e apenas a distribuição de volumes de poros para o de Daian. Como será visto, a diferença básica entre esses modelos, é que o de Neimark trabalha com três fases a cada escala — poros, sólidos e cinza (que será transformada em uma outra escala) — e o de Daian com duas fases a cada escala, poros e sólido.

Este trabalho apenas apresenta o processo construtivo do SME de Neimark, sendo a atenção voltada para o estudo do SME de Daian.

A distribuição de volumes de poros no SME de Daian pode, como será visto, ser relacionada com a função de covariograma. Torna-se possível dessa forma, em princípio, a reconstituição em SME a partir dos valores de covariograma. Pensando nesta questão, Daian (1992c), propõe, fundamentado na construção geométrica do SME, uma equação que relaciona o covariograma com a fração de volumes por classes. A equação obtida demonstra, para o caso específico do SME de Daian, uma relação biunívoca entre a distribuição de poros e o covariograma.

Mostram-se as idéias envolvidas na obtenção da equação de Daian, e em seguida procede-se a reconstituição em SME, de algumas distribuições de volumes de poros e porosidades de meios fictícios, com o intuito de se analisar o comportamento da equação. Será observado que esta equação não leva em consideração dois fatores intrínsecos à configuração geométrica e ao

processo construtivo do SME. Este trabalho propõe então uma nova equação, visando atender esses fatores.

Ainda neste capítulo, propõe-se um modelo que visa obter o covariograma total da composição de duas imagens, a partir do conhecimento do covariograma de cada imagem em separado.

No próximo capítulo, simulam-se processos de intrusão de mercúrio na estrutura da pasta de ligantes, reconstituída em SME, comparando-se com dados experimentais, com o fim de demonstrar a aplicabilidade do modelo proposto.

5.2. O Modelo Multiescala como Concebido por Neimark (1989)

Para a construção do SME de Neimark, tome-se como partida um quadrado, composto de células também quadradas de tamanho linear r_1 (a construção em 3D é completamente similar), figura 5.1a.

Estas células, de tamanho r_1 , constituem a primeira escala do sistema e são divididas em três diferentes tipos denominados X, Y e Z. Como feito em um modelo clássico de percolação para três componentes, a escolha do tipo de célula é randômica, com probabilidades x_1 , y_1 , e z_1 respectivamente, onde $x_1 + y_1 + z_1 = 1$.

Do ponto de vista da modelação geométrica de uma estrutura porosa, pode-se dizer que as células do tipo X são poros, as do tipo Y correspondem à matriz sólida e as Z são células cinza que devem ser observados em uma outra escala (associada a um maior aumento microscópico).

E assim é no SME: para a primeira escala são conservadas as células dos tipos X e Y e, mantendo-se a topologia do quadrado original, divide-se as células Z em n_1^2 células de segunda escala de tamanho $r_2 = r_1/n_1$, que serão novamente decompostas em células X, Y, Z com probabilidades x_2 , y_2 e z_2 respectivamente, figura 5.1b.

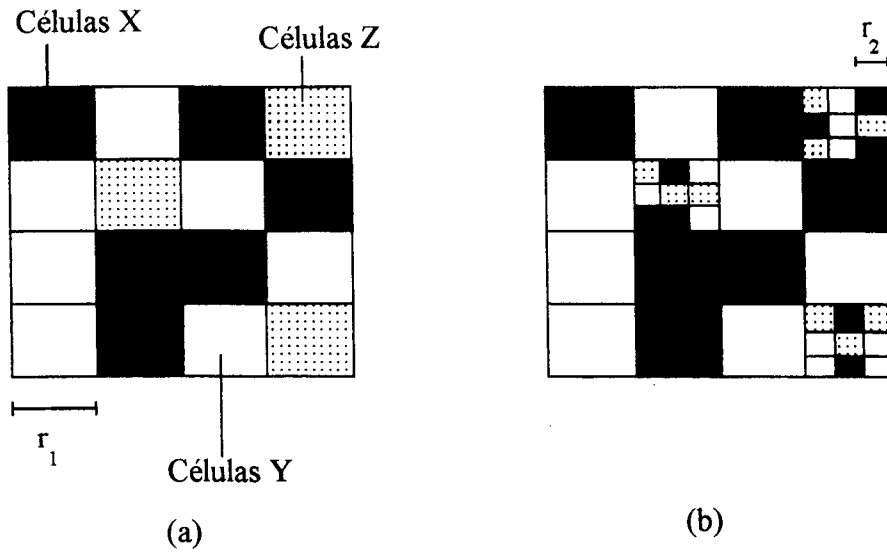


Figura 5.1. O processo de construção do SME de Neimark (1989).

Este é o primeiro passo da construção, e no segundo mantém-se as células X e Y da segunda escala, dividindo as Z para fornecer uma terceira escala de células de tamanho r_3 com probabilidades x_3 , y_3 , z_3 e assim sucessivamente até uma escala de construção apropriada de forma a representar a estrutura porosa.

Na última escala construída, as células do tipo Z devem ser associadas à matriz sólida ou aos poros, significando que se tem apenas poros e matriz sólida completamente observáveis não necessitando um aumento microscópico maior.

Neimark (1989) denomina os parâmetros n_i de múltiplos de fracionamento. A realização do processo de divisão das células do tipo Z, $n-1$ vezes, conduz à obtenção de um sistema composto de n escalas, consistindo de células X e Y de tamanhos $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$ e células Z de tamanho r_n na última escala, que como dito acima são convertidos em células do tipo X ou Y. O SME é completamente descrito pelos parâmetros r_i , n_i ($i = 1, 2, \dots, n-1$), x_i , y_i , ($i = 1, 2, \dots, n$).

Um SME com uma dada distribuição de poros pode ser obtido escolhendo-se apropriadamente os parâmetros n_i , x_i e y_i . A porosidade ε_i^X das células de tamanho r_i , que pertencem à i -ésima escala será:

$$\varepsilon_i^x = x_i \prod_{j=1}^{i-1} z_j \quad (5.1.)$$

e a fração de volume ε_i^y da matriz sólida para a i-ésima escala:

$$\varepsilon_i^y = y_i \prod_{j=1}^{i-1} z_j \quad (5.2.)$$

A porosidade total do sistema a n escalas (fração de volume das células X) será dada por:

$$\varepsilon_n = \sum_{i=1}^n x_i \prod_{j=1}^{i-1} z_j \quad (5.3.)$$

Desta forma, para uma sequência de escalas $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$ o conhecimento experimental das distribuições ε_i^x e ε_i^y , permite em concordância com as equações 5.1 e 5.2 a determinação dos parâmetros x_i e y_i para a construção de um SME a n escalas. A partir de seu SME genérico, Neimark (1989) mostra algumas construções particulares. Por exemplo, assumindo-se os parâmetros $y_i = 0$ vem um tapete de Sierpinski randômico. Caso o processo de construção se limite a uma iteração, obtém-se um sistema de percolação a duas escalas.

Neimark (1989) mostra que quando os parâmetros de construção do SME, não dependem do passo de geração, isto é, $x_i=x$, $y_i=y$ e $n_i=n$, obtém-se um sistema autosimilar, como definido no capítulo 3.

Para o sistema autosimilar, Neimark (1989) obteve o limite de percolação através da transformação de grupo de renormalização, teoria esta que será comentada no capítulo seguinte.

5.3. O Modelo Multiescala de Daian (1992a, 1992b)

Para o entendimento do modelo proposto por Daian (1992a, 1992b) considere-se novamente um quadrado inicial que será a base para a criação da estrutura. Este modelo trabalha com classes de poros (escalas com um tamanho de célula característico) que variam em

potência de dois. Assim, para a classe do menor poro tem-se um tamanho de célula d sendo esta classe indicada pelo índice n .

Uma classe de índice i será formada por células cujo tamanho d_i será dado por:

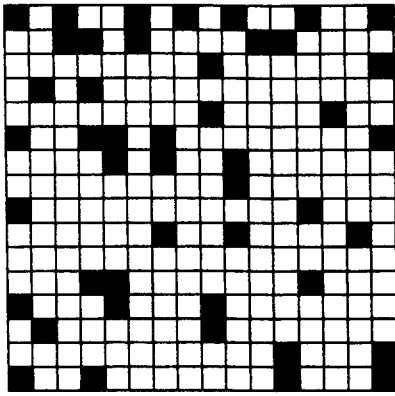
$$d_i = (2^{n-i})d \quad (5.4.)$$

assim, as células a partir da n -ésima escala terão tamanho $d, 2d, 4d, 8d, \dots$

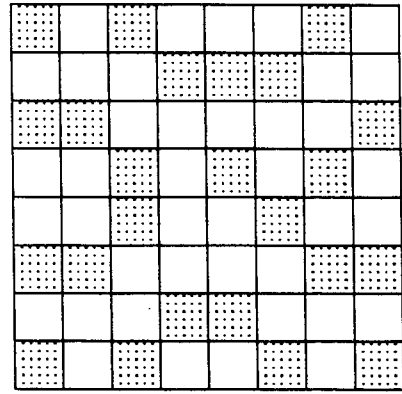
Para exemplificar, nos limitaremos a um sistema de $n=3$ classes, onde fica clara a extensão do número de classes para sistemas com distribuição de poros larga onde por exemplo considerando $d, 2d, 4d, \dots, 2^{10}d$ ($n=11$) pode-se representar poros que vão digamos de 200\AA a aproximadamente $20\mu\text{m}$, evidentemente com custos computacionais importantes associadas às redes bastante grandes necessárias.

Cada classe i é agora ocupada aleatoriamente por células de tamanho d_i com uma proporção definida p_i , vejam-se as figuras 5.2a, 5.2b e 5.2c.

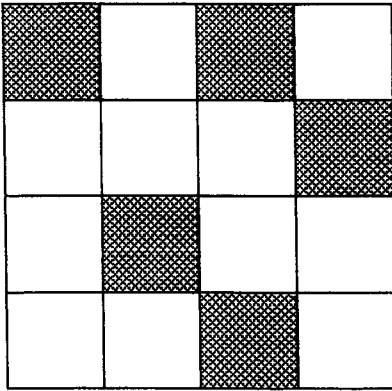
Em seguida, procede-se uma superposição das n classes, e as células que restam aparentes constituem o SME, veja-se a figura 5.2d.



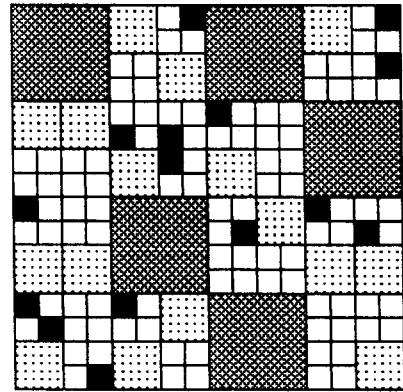
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.2. A composição do SME de Daian. Nas figuras a, b e c as classes 3, 2 e 1 são ocupadas com proporções p_3 , p_2 , e p_1 , respectivamente. Na figura d é realizada a superposição.

Após a superposição, as proporções de volumes reais para cada classe i será:

$$v_i = p_i(1 - p_{i-1})...(1 - p_1) \quad (5.5.)$$

Na prática, para a criação do SME o que se conhece são volumes v_i (obtidos experimentalmente da função distribuição de poros) devendo-se resolver a equação (5.5.) para a obtenção das proporções de ocupação p_i :

$$\begin{aligned}
 p_1 &= v_1 \\
 p_2 &= v_2 / (1 - p_1) \\
 p_3 &= v_3 / (1 - p_2)(1 - p_1) \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 &\vdots
 \end{aligned}
 \tag{5.6.}$$

São tecidos a seguir, alguns comentários acerca dos modelos de SME, como concebidos por Neimark e por Daian. Em primeiro lugar, deve ser notado, que o modelo de Neimark necessita do conhecimento das frações de volumes de poros e sólidos, para uma seqüência de escalas características de tamanhos $r_1 \gg r_2 \gg \dots r_n$. Para tanto, deve-se dispor de imagens, representando a microestrutura do material poroso. O que realmente é feito, consiste de uma separação de escalas e deve-se satisfazer, como visto na introdução deste trabalho, à condição $r_{i+1} / r_i \ll 1$. Na concepção original do modelo de Neimark (1989), cada escala i é ocupada randomicamente com proporções x_i , y_i e z_i , e os objetos têm o mesmo tamanho característico r_i da dada escala. Isto significa que a nível de cada escala separadamente, tem-se a limitação de meio não correlacionado (o que também ocorre no modelo de Daian). Ainda, uma vez que cada escala é ocupada com objetos do mesmo tamanho característico da escala, e como deve-se ter $r_{i+1} / r_i \ll 1$, cada escala agrupará em uma mesma classe de tamanho de poro, uma razoável gama de tamanhos diferentes de poros. Outra questão a ser observada no modelo de Neimark, se refere aos tamanhos de rede, em cada escala, que sejam estatisticamente representativas. Para exemplificar, tome-se uma primeira escala de tamanho característico $r_1 = 10000\text{\AA}$. Suponha-se agora que a segunda seja constituída por objetos de tamanho $r_2 = 1000\text{\AA}$, o que dá uma razão aceitável de $1000/10000 = 0.1$. Dessa forma, a decomposição de uma célula da primeira escala formará uma rede de 10×10 células da segunda escala, que provavelmente não será representativa. Se tomarmos $r_2 = 100\text{\AA}$, teremos uma razão de comprimentos de escalas de 0.01 e redes de 100×100 células na segunda escala, o que é bastante melhor. Contudo, tem-se aqui um rápido decaimento nos tamanhos das classes de poros.

Salienta-se que quando da composição das várias escalas, o SME formado apresentará uma correlação entre os poros das diferentes escalas.

O SME, da maneira imaginada por Daian, necessita apenas do conhecimento da distribuição de volumes do espaço poroso, a qual pode ser derivada das micrografias, ou da isoterma de adsorção de vapor de água, entre outras maneiras. Neste modelo, cada escala é formada por uma classe de poros extraída da função distribuição de volumes de poros. Uma limitação é que os tamanhos de poros das classes crescem, como visto, em potências de dois, d , $2d$, $4d$, $8d$, ..., o que implica novamente em agrupar uma gama de diâmetros de poros diferentes em uma única classe. Notifica-se, que um estudo preliminar foi realizado durante este trabalho, no sentido de contornar essa limitação, construindo um SME com crescimento linear para o tamanho das classes. Este estudo é ainda bastante incipiente, devendo ser desenvolvido e apresentado no futuro.

Os modelos de SME de Neimark e de Daian, constituem processos de reconstituição da microestrutura de materiais porosos. É interessante observar que a hipótese de isotropia estatística nos permite gerar a partir do conhecimento das frações de volumes de poros (adicionalmente, a de sólidos no modelo de Neimark) a reconstrução tridimensional da microestrutura.

5.4. Reconstituição em Sistema Multiescala. A Obtenção da Equação Relacionando Covariograma e Fração de Volume por Escala (Daian, 1992c)

As frações de volume $v_1, v_2, \dots, v_i, \dots, v_n$ de uma estrutura multiescala podem ser relacionadas com os valores de covariograma do espaço poroso, aqui com a notação $C(u)$. Isto significa que se pode, em princípio, gerar um sistema multiescala a partir do conhecimento do covariograma. A idéia é que um SME é intrinsecamente correlacionado para deslocamentos inferiores ao tamanho d_1 associado às células da primeira classe (as maiores).

De fato, as células de uma dada classe $i-1$ podem ser encaradas como agrupamentos de células menores (classes com índice superior a $i-1$). Assim, uma célula de tamanho d_{i-1} pode ser considerada como um agrupamento de células de tamanho d_i correlacionadas, veja-se figura 5.3.

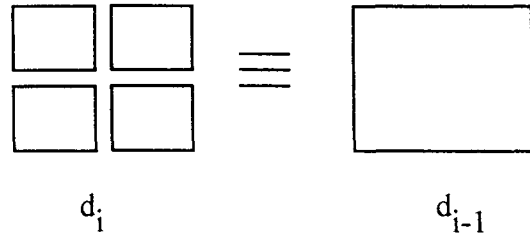


Figura 5.3. O agrupamento de células da classe i formando uma célula da classe $i-1$.

Considera-se a seguir o problema direto de determinação do covariograma de um SME, com construção como descrita acima.

5.4.1. Determinação do Covariograma de um SME

Seja um SME constituído de n escalas e com porosidade total ε . Considere-se uma escala i de tamanho $d_i = (2^{n-i})d$ e deslocamentos x_j múltiplos da dimensão d da menor célula, dados por:

$$x_j = (2^{j-1})d \tag{5.7.}$$

Uma ilustração desta operação de deslocamento é mostrada na figura 5.4.

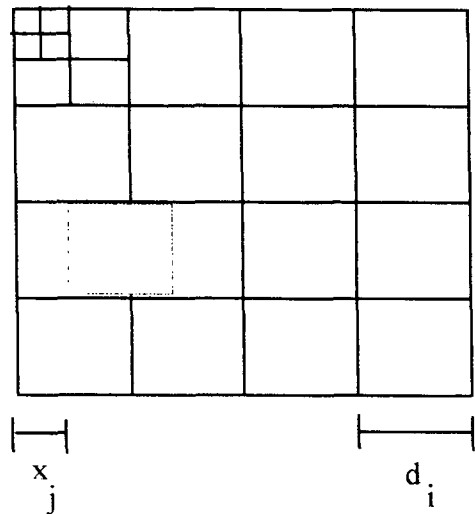


Figura 5.4. Uma célula de tamanho d_i conduzida a um deslocamento x_j .

Para uma célula d_i , o volume de intersecção obtido quando esta célula é deslocada de $x_j < d_i$ será composto de duas parcelas:

i) Intersecção da célula com ela mesma, que será dada por:

$$v_i \left(\frac{d_i - x_j}{d_i} \right) \quad (5.8.)$$

que, considerando-se as equações (5.4) e (5.7) para d_i e x_j pode ser escrita:

$$v_i \left(1 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \right) \quad (5.9.)$$

ii) Volume de intersecção de uma célula d_i com as outras células do sistema:

$$\sum_{k=1}^n v_i \frac{x_j}{d_i} v_k = \varepsilon v_i \frac{x_j}{d_i} = \frac{\varepsilon v_i}{2^{n-i-j+1}} \quad (5.10.)$$

Para deslocamentos $x_j \geq d_i$ o volume de intersecção será:

$$\sum_{k=1}^n v_i v_k = \varepsilon v_i \quad (5.11.)$$

Agora, $x_j < d_i$ implica em $2^{j-1} < 2^{n-1}$ o que dá $i < n-j+1$.

Isto significa que para um dado deslocamento x_j , as células das classes 1 a $(n-j)$ sofrerão as parcelas de intersecção delas com elas mesmas e também com outras células do SME; as células das classes $(n-j+1)$ a n terão apenas intersecções com as outras células, uma vez que já se “liberaram” de si mesmas. Assim, a intersecção total para um deslocamento x_j que será o covariograma para o dado deslocamento se escreve:

$$C(x_j) = \sum_{i=1}^{n-j} \left[v_i \left(1 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \right) + \frac{\varepsilon v_i}{2^{n-i-j+1}} \right] + \sum_{i=n-j+1}^n \varepsilon v_i \quad (5.12.)$$

ou,

$$C(x_j) = \sum_{i=1}^{n-j} \left[v_i \left(1 - \frac{1-\varepsilon}{2^{n-i-j+1}} \right) \right] + \varepsilon \sum_{i=n-j+1}^n v_i \quad (5.13.)$$

A equação (5.13.) será denominada daqui em diante por equação CVD (alusão à equação relacionando Covariograma e Volume de poros proposta por Daïan). Deve ser notado que os deslocamentos $x_j = (2^{j-1})d$ têm como x_j mínimo o tamanho d da menor célula, não sendo possível com esta equação designar o deslocamento nulo, mas teoricamente sabe-se que $C(x_j = 0) = \varepsilon$. Para a geração do SME a partir do covariograma se verá adiante como contornar esta questão.

Pode-se verificar que, para o maior deslocamento onde $j = n$ e $x_j = (2^{n-1})d = d_1$, a dimensão da maior célula, a equação (5.13.) fornece $C(x_n) = \varepsilon^2$, como previsto teoricamente, veja-se a seção 2.4.

5.4.2. Obtenção das frações de Volumes v_i a partir do covariograma. O Problema Inverso

Considere-se novamente a equação (5.13.), a qual pode ser reescrita das seguintes formas:

$$C(x_j) = \sum_{i=1}^{n-j} v_i \left(1 - \frac{1-\varepsilon}{2^{n-i-j+1}} \right) + \varepsilon \left(\varepsilon - \sum_{i=1}^{n-j} v_i \right) = \sum_{i=1}^{n-j} v_i (1-\varepsilon) \left(1 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \right) + \varepsilon^2 \quad (5.14.)$$

Da equação anterior obtêm-se:

$$C(x_{n-j}) = (1-\varepsilon) \sum_{i=1}^j v_i \left(1 - \frac{1}{2^{j-i+1}} \right) + \varepsilon^2 \quad (5.15.)$$

$$C(x_{n-j+1}) = (1 - \varepsilon) \sum_{i=1}^{j-1} v_i \left(1 - \frac{1}{2^{j-i}}\right) + \varepsilon^2 \quad (5.16.)$$

subtraindo a equação (5.16.) da (5.15.) tem-se:

$$C(x_{n-j}) - C(x_{n-j+1}) = (1 - \varepsilon) \left[\frac{v_j}{2} + \sum_{i=1}^{j-1} v_i \frac{1}{2} \frac{1}{2^{j-i}} \right] \quad (5.17.)$$

donde se obtém a expressão para v_j :

$$v_j = \frac{2}{(1 - \varepsilon)} \left[C(x_{n-j}) - C(x_{n-j+1}) \right] - \sum_{i=1}^{j-1} v_i \frac{1}{2^{j-i}} \quad (5.18.)$$

Dessa forma as frações de volumes v_j podem ser obtidas conhecendo-se os v_i ($i=1, \dots, j-1$) e os covariogramas $C(x_{n-j+1})$ e $C(x_{n-j})$.

A equação (5.18.), da maneira como foi obtida, mostra uma relação biunívoca entre as funções distribuição de poros e covariograma.

Para exemplificar, considere que se conheça cinco pontos experimentais que descrevem o covariograma de uma dada imagem desde o deslocamento nulo até o deslocamento que fornece o valor de covariograma igual a ε^2 . Dispõe-se então dos valores de $C(x_j=0)$, $C(x_1)$, $C(x_2)$, $C(x_3)$, $C(x_4)$. Aqui deve ser notado que o deslocamento x_1 corresponde a um múltiplo M do deslocamento elementar (denotado desloc) da maneira como foi determinado o covariograma, $x_1 = M\text{desloc}$, e então $x_2 = 2M\text{desloc}$, $x_3 = 4M\text{desloc}$ e $x_4 = 8M\text{desloc}$, similar à construção do SME.

Com base na equação (5.18.) e observando que cinco valores de covariograma conduzem a um SME de $n=4$ classes vêm:

$$\begin{aligned}
v_1 &= \frac{2}{1-\varepsilon} [C(x_3) - C(x_4)] \\
v_2 &= \frac{2}{1-\varepsilon} [C(x_2) - C(x_3)] - \frac{v_1}{2} \\
v_3 &= \frac{2}{1-\varepsilon} [C(x_1) - C(x_2)] - \frac{v_1}{4} - \frac{v_2}{2}
\end{aligned} \tag{5.19.}$$

Como não se pode entrar diretamente com o covariograma para deslocamento nulo na equação (5.18.), a fim de juntamente com $C(x_1)$ se obter o volume v_4 da 4ª classe, procede-se esta determinação com base na equação para o dado exemplo:

$$v_4 = \varepsilon - \sum_{i=1}^3 v_i \tag{5.20.}$$

Quer dizer, para a classe dos menores poros atribui-se a fração de volume que falta para completar a porosidade total.

5.5. Verificação da Equação CVD para um caso Específico de Geração do SME

Nesta seção, realiza-se a geração do SME de Daian, a partir de valores selecionados de frações de volumes v_i , visando a comparação entre o covariograma teórico calculado pela equação CVD e o covariograma medido no sistema gerado. O SME será gerado, considerando-se uma porosidade total de 0.70 e frações de volumes dadas por:

$$\begin{aligned}
v_1 &= 0.30 \\
v_2 &= 0.20 \\
v_3 &= 0.15 \\
v_4 &= 0.05
\end{aligned}$$

Procedeu-se à geração deste SME, diretamente a partir das frações em volume, considerando-se redes de 1024x1024 células para a quarta classe. Dessa forma, para as outras

escalas têm-se as redes: 512x512 células para a terceira escala; 256x256 células para a segunda escala e 128x128 para a primeira escala. Efetuaram-se quatro gerações onde o parâmetro variável é a semente do gerador aleatório.

Os valores médios obtidos e seus desvios padrões para o volume gerado, o covariograma medido diretamente no SME gerado, bem como o covariograma calculado pela equação CVD (considerando-se como dados de entrada os volumes efetivamente gerados) são mostrados na tabela 5.1.

Tabela 5.1. Comparação dos covariogramas medidos e calculados.

i	vi gerado	covar calculado CVD	covar medido
1	0.2993±0.0012	0.6360±0.0012	0.6005±0.0036
2	0.2000±0.0004	0.5872±0.0014	0.5442±0.0041
3	0.1506±0.0005	0.5347±0.0014	0.5088±0.0038
4	0.0500±0.0001	0.4898±0.0013	0.4896±0.0040

Pode ser notado para este SME específico que, para os deslocamentos x_1 , x_2 , x_3 os valores de covariograma calculados se apresentam superiores ao medidos (considerando-se os desvios padrões associados).

De fato, realizaram-se outras gerações com porosidades e frações de volumes diferentes e com maior ou menor diferença este comportamento se repetia. A diferença entre os valores de covariograma calculados e medidos talvez seja aceitável (quando se consideram estes processos de geração aleatória), contudo, o que chamou a atenção foi o comportamento sistemático do covariograma calculado ser superior ao medido.

Ora, ou a equação CVD apresenta alguma deficiência ou o processo de geração foge de alguma maneira ao idealizado. Partiu-se inicialmente para a observação de alguns parâmetros no processo de geração como: os valores de volumes gerados, uma possível correlação apreciável em cada escala separadamente e representatividade estatística das redes. Como o comportamento desses parâmetros se apresentou bastante próximo do idealizado, no modelo de

SME, procedeu-se então a uma análise da equação CVD. Isto conduziu a uma nova equação, que será denominada CVDM (alusão à equação Covariograma-Volume de Daian Modificada) e que será detalhada na seção seguinte.

5.6. Obtenção de uma Nova Equação relacionando Covariograma e Frações de Volumes

Exemplos de geração de SME, como o visto na seção anterior, nos motivaram a uma análise da equação CVD e do próprio processo construtivo do sistema. Dessa maneira, considere-se o SME mostrado na figura 5.5, composto de apenas duas escalas, onde a segunda escala apresenta 8x8 células.

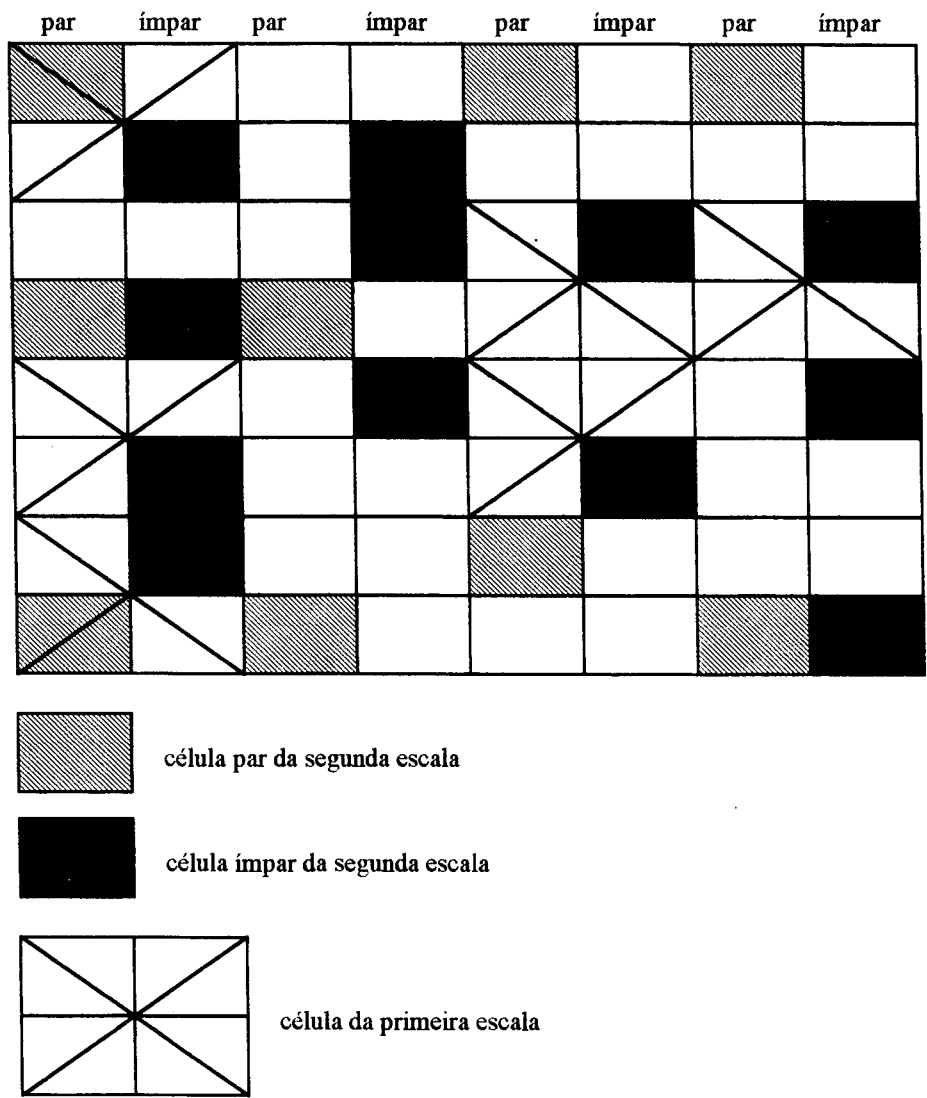


Figura 5.5. Um exemplo de SME a duas escalas.

As colunas do SME são rotuladas alternadamente como par e ímpar, sendo a primeira coluna à esquerda par. As células da segunda escala (as menores) são distribuídas aleatoriamente com uma proporção de ocupação p_2 que após o recobrimento pela primeira escala darão uma fração volumétrica v_2 , ($v_2 = p_2(1 - p_1)$). A primeira escala apresenta uma proporção p_1 que é igual à fração volumétrica v_1 .

Pode ser notado, que após o recobrimento, a existência de uma célula par da segunda escala — que não foi recoberta pela primeira escala — implica necessariamente que a célula imediatamente à direita nunca poderá fazer parte de uma célula da primeira classe, devido à maneira peculiar como é feito o processo de recobrimento. Para o caso genérico de um SME a n escalas, significa que se existe uma célula rotulada como par da escala i que não foi recoberta, a célula imediatamente vizinha só poderá pertencer a escalas de índices maior ou igual a i .

Ora, no desenvolvimento de Daïan (1992c) considera-se que uma dada célula d_i em qualquer posição do sistema e para deslocamentos $x_j < d_i$ tem uma fração de volume que pode interagir com todas as outras classes. Esta consideração deve sobreestimar o volume total de intersecções. Dito de outra forma, a equação CVD não considera este efeito de correlação espacial entre as células de diferentes classes oriunda do processo de construção do SME. Note-se agora que quando uma célula par da segunda escala é submetida a deslocamentos iguais ou superiores a duas vezes o seu tamanho, já existe a possibilidade de intersecção com células da primeira escala.

Vamos agora considerar no SME a duas classes um deslocamento x_1 , que equivale a um deslocamento de comprimento igual ao tamanho das células da segunda escala. A probabilidade de existência de uma célula par da segunda escala será $\frac{1}{2}v_2$. A existência da célula vizinha da mesma classe deve ser considerada no universo de p_2 , visto que necessariamente não houve recobrimento. Assim, a probabilidade de intersecção será $\frac{1}{2}v_2p_2$. Agora, a probabilidade de ocorrência de uma célula ímpar da segunda escala será também $\frac{1}{2}v_2$. Contudo, a existência de uma célula vizinha da mesma classe deverá ser tomada no universo de v_2 , visto que existe a

possibilidade de recobrimento por células da primeira classe. Isto conduz a uma probabilidade de intersecção igual a $\frac{1}{2}v_2v_2$.

A probabilidade de intersecção de uma célula ímpar da segunda escala com uma célula da primeira escala (par ou ímpar) será $\frac{1}{2}v_2v_1$. Não existe, como já dito, a possibilidade de intersecção de uma célula par da segunda escala com uma célula da primeira escala, para o deslocamento x_1 .

As células da primeira escala poderão se intersectar com elas mesmas e com células da segunda e primeira escala, o que dá como intersecção $\frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{2}v_1(v_1 + v_2)$. Assim tem-se:

$$C(x_1) = \frac{1}{2}v_2^2 + \frac{1}{2}v_2p_2 + \frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{2}v_1^2 + v_1v_2 \quad (5.21.)$$

Faz-se agora uma generalização dessas idéias visando a obtenção de uma nova relação entre covariograma e fração de volumes por classes, em um SME a n escalas. Para tanto, introduz-se inicialmente uma variável g_{rs} , que designa o recobrimento parcial da classe s por células até a classe r :

$$g_{rs} = \begin{cases} p_s \prod_{k=s-1}^r (1 - p_k), & \text{se } r < s \\ p_r, & \text{se } r = s \end{cases} \quad (5.22.)$$

Esta variável é introduzida com o fim de atender o requisito de que uma célula par da escala i só poderá interagir com classes de índices iguais ou maiores que i .

Considere-se, como feito anteriormente, os casos de deslocamentos x_j e os volumes de intersecções.

i) deslocamentos $x_j < d_i$

a) intersecção das células d_i com elas mesmas:

$$v_i \left(1 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \right) \quad (5.23.)$$

b) intersecção das células d_i com outras células:

$$\frac{1}{2} v_i \frac{x_j}{d_i} \varepsilon + \frac{1}{2} v_i \frac{x_j}{d_i} \sum_{k=1}^n g_{ik} \quad (5.24.)$$

Nesta equação o termo da esquerda designa, analogamente ao exemplo da figura 5.5, as células ímpares da escala i que podem se intersectar com todas as outras classes; o termo da direita se refere às células pares que podem interagir com outras células da mesma classe e de tamanhos menores. Na equação anterior, substituindo-se as expressões para x_j e d_i tem-se:

$$\frac{1}{2} v_i \left(\frac{1}{2^{n-i-j+1}} \right) \left[\varepsilon + \sum_{k=1}^n g_{ik} \right] \quad (5.25.)$$

ii) deslocamentos $a_i \leq x_j < 2d_i$, tem-se a intersecção:

$$\frac{1}{2} v_i \left(\frac{2d_i - x_j}{d_i} \right) \sum_{k=1}^n g_{ik} + \frac{1}{2} v_i \left(\frac{x_j - d_i}{d_i} \right) \varepsilon + \frac{1}{2} v_i \varepsilon \quad (5.26.)$$

Nesta equação o primeiro termo representa a fração de volume de células d_i pares que podem se intersectar apenas com elas mesmas e menores. O segundo termo está associado à fração de volume de células pares que podem se intersectar com todas as outras classes. O último termo se refere às células ímpares que podem se intersectar com toda a porosidade.

A equação anterior é escrita na forma:

$$\frac{1}{2} v_i \varepsilon \left(2 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \right) \left[\frac{1}{\varepsilon} \sum_{k=i}^n g_{ik} + 1 \right] \quad (5.27.)$$

iii) Para deslocamentos $x_j \geq d_i$ obtém-se o volume de intersecções:

$$v_i \varepsilon \quad (5.28.)$$

pois todas as células (pares ou ímpares) de uma escala i poderão se intersectar com todas as classes. Agora, $x_j < d_i$ implica em $i < n - j + 1$. As desigualdades $d_i \leq x_j < 2d_i$ conduzem a $n - j + 1 \leq i < n - j + 2$ o que significa apenas $i = n - j + 1$. Finalmente $x_j \geq 2d_i$ nos leva a $i \geq n - j + 2$. A parcela de intersecção de deslocamentos $d_i \leq x_j < 2d_i$ pode ser reescrita, levando-se em conta que para esse caso tem-se apenas $i = n - j + 1$, como:

$$\frac{1}{2} \varepsilon v_{n-j+1} \left[\frac{1}{\varepsilon} \sum_{k=n-j+1}^n g_{(n-j+1)k} + 1 \right] \quad (5.29.)$$

Dessa forma, o covariograma para um dado deslocamento x_j se escreve :

$$C(x_j) = \sum_{i=1}^{n-j} v_i \left\{ 1 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\varepsilon + \sum_{k=i}^n g_{ik} \right) \right] \right\} + \frac{1}{2} \varepsilon v_{n-j+1} \left[\frac{1}{\varepsilon} \sum_{k=n-j+1}^n g_{(n-j+1)k} + 1 \right] \\ + \varepsilon \sum_{i=n-j+2}^n v_i \quad (5.30.)$$

Considere-se agora como feito por Daian (1992c), que uma dada célula d_i em qualquer posição pode interagir com toda a porosidade. Isto significa fazer $\sum_{k=r}^n g_{rk} = \varepsilon$ e desta forma a equação (5.30.) é escrita:

$$C(x_j) = \sum_{i=1}^{n-j} v_i \left\{ 1 - \frac{1}{2^{n-i-j+1}} \left[1 - \frac{1}{2}(\varepsilon + \varepsilon) \right] \right\} + \frac{1}{2} \varepsilon v_{n-j+1} \left(\frac{1}{\varepsilon} \varepsilon + 1 \right) + \varepsilon \sum_{i=n-j+2}^n v_i \quad (5.31.)$$

ou,

$$C(x_j) = \sum_{i=1}^{n-j} v_i \left[1 - \frac{1 - \varepsilon}{2^{n-i-j+1}} \right] + \varepsilon \sum_{i=n-j+1}^n v_i \quad (5.32.)$$

E assim recupera-se a equação CVD desenvolvida por Daian. Note-se que a equação CVDM é obtida levando-se em conta duas modificações em CVD: de uma parte a consideração de que células pares da escala i só interagem com células de índices $k \geq i$ e de outra que esta interação é descrita pela variável g_{is} e não os volumes v_k .

5.7. Geração de SME. Comparação dos Covariogramas Calculados por CVD e CVDM com os Covariogramas Medidos

Considerou-se a geração de SME para os casos de distribuição de volumes mostrados na tabela 5.2.

Tabela 5.2. Quatro Casos de Distribuição de Volumes para Geração de SME.

	Caso C-1	Caso C-2	Caso C-3	Caso C-4
v1	0.01	0.06	0.05	0.3
v2	0.02	0.03	0.15	0.2
v3	0.03	0.02	0.2	0.15
v4	0.06	0.01	0.3	0.05
Porosidade Total	0.12	0.12	0.7	0.7

Note-se que, para os quatro casos, a cada dois, a porosidade é a mesma, alterando-se a ordem das frações de volumes. Todos os casos foram simulados com redes de 1024x1024 células para a quarta escala. O tempo de processamento necessário para a geração de um tal sistema em um microcomputador 486 da linha PC (com coprocessador matemático e operando

na frequência de 33 MHz) é de aproximadamente quatro minutos. Para os casos C-1 e C-4 realizaram-se quatro gerações (variando a semente do gerador aleatório) enquanto que para os casos C-2 e C-3 três gerações foram efetuadas. Para cada geração mede-se as frações de volumes efetivamente geradas bem como os valores de covariograma. Com os volumes gerados, calcula-se os covariogramas utilizando as equações CVD e CVDM. Na tabela 5.3. são apresentados os resultados médios das variáveis medidas e calculadas.

Tabela 5.3. Os valores de covariograma calculados e medidos.

	Índice i	Volume Gerado	Covar CVD	Covar CVDM	Covar Medido
	1	0.0099±0.0005	0.0484±0.0007	0.0465±0.0007	0.0461±0.0005
Caso C-1	2	0.0200±0.0003	0.0297±0.0006	0.0293±0.0006	0.0285±0.0005
	3	0.0300±0.0001	0.0188±0.0004	0.0187±0.0004	0.0182±0.0005
	4	0.0601±0.0001	0.0144±0.0002	0.0144±0.0002	0.0145±0.0002
	1	0.0600±0.0011	0.0887±0.0005	0.0875±0.0005	0.0874±0.0023
Caso C-2	2	0.0293±0.0007	0.0669±0.0005	0.0656±0.0005	0.0649±0.0025
	3	0.0200±0.0001	0.0407±0.0006	0.0399±0.0006	0.0389±0.0026
	4	0.0100±0.0001	0.0143±0.0001	0.0143±0.0001	0.0138±0.0011
	1	0.0503±0.0008	0.5667±0.0007	0.5326±0.0006	0.5261±0.0015
Caso C-3	2	0.1494±0.0003	0.5236±0.0008	0.5156±0.0007	0.5021±0.0013
	3	0.1997±0.0003	0.4974±0.0008	0.4963±0.0007	0.4922±0.0017
	4	0.3006±0.0002	0.4899±0.0007	0.4899±0.0007	0.4895±0.0013
	1	0.2993±0.0012	0.6360±0.0012	0.6076±0.0012	0.6005±0.0036
Caso C-4	2	0.2000±0.0004	0.5872±0.0014	0.5582±0.0013	0.5442±0.0041
	3	0.1506±0.0005	0.5347±0.0014	0.5218±0.0013	0.5088±0.0038
	4	0.0500±0.0001	0.4898±0.0013	0.4898±0.0013	0.4896±0.0040

Na tabela 5.4. mostram-se as variações percentuais dos covariogramas calculados por CVD e CVDM em relação aos medidos. A variação percentual Var% foi avaliada pela equação seguinte:

$$\text{Var\%} = \frac{\text{CC} - \text{CM}}{\text{CM}} \times 100 \quad (5.33.)$$

onde:

CC é o covariograma calculado, seja através de CVD ou CVDM e CM é o covariograma medido.

A incerteza Im em Var é avaliada através de :

$$\text{Im} = \left[\left(\frac{1}{\text{CM}} \Delta \text{CC} \right)^2 + \left(\frac{\text{CC}}{\text{CM}^2} \Delta \text{CM} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (5.34.)$$

onde ΔCC e ΔCM são as incertezas em CC e CM respectivamente.

Tabela 5.4. Variação percentual dos covariogramas calculados em relação aos medidos.

	Índice i	Var para CVD (%)	Var para CVDM (%)
	1	4.99±1.90	0.87±1.87
Caso C-1	2	4.21±2.79	2.81±2.77
	3	3.30±3.59	2.75±3.58
	4	0.69±1.94	0.69±1.94
	1	1.49±2.73	0.11±2.70
Caso C-2	2	3.08±4.04	1.08±3.97
	3	4.63±7.16	2.57±7.03
	4	3.62±8.29	3.62±8.29
	1	7.72±0.33	1.24±0.31
Caso C-3	2	4.28±0.31	2.69±0.30
	3	1.06±0.39	0.83±0.38
	4	0.08±0.30	0.08±0.30
	1	5.91±0.67	1.18±0.64
Caso C-4	2	7.90±0.85	2.57±0.81
	3	5.09±0.83	2.56±0.81
	4	0.04±0.86	0.04±0.86

A seguir são tecidos alguns comentários acerca dos resultados obtidos. Primeiramente pode ser observado que as médias para o covariograma calculado por CVD são maiores que as calculadas por CVDM que por sua vez são maiores que os valores medidos (à exceção do deslocamento x_4). Note que se está falando dos valores médios: os desvios para os covariogramas calculados por CVD e CVDM são extremamente próximos, contudo, se apresentam superiores para aqueles medidos. Uma análise mais rigorosa exigiria um aumento do número de gerações, mas, considera-se que o comportamento dos covariogramas permanecerá essencialmente o mesmo.

Pode ser notado também que para deslocamentos x_1 a variação percentual diminui, quando se usa a equação CVD, para as porosidades de 0.12 e 0.70 nos sistemas em que a fração de volumes é feita com V_1 grande, ou seja, para os casos C-2 e C-4.

No que tange ao comportamento sistemático das médias de covariogramas calculados por CVDM, embora próximas, serem superiores aos covariogramas medidos, procedem-se algumas considerações. O modelo construído neste trabalho, assume que para deslocamentos $d_i \leq x_j < 2d_i$, uma fração de volume das células d_i pode se intersectar com todas as outras classes, equação 5.26. Isto não é sempre correto, e pode ser facilmente visto. Para tanto, considere-se um SME composto de três classes, onde uma parte desse SME é mostrada na figura 5.6.

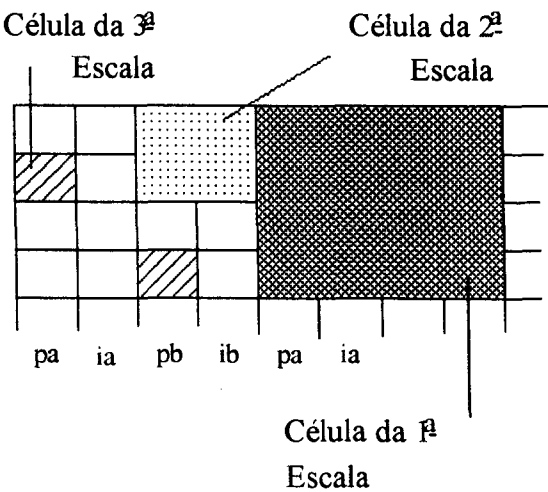


Figura 5.6. Representação de uma parte de um SME composto de três escalas.

Para a célula da terceira escala rotulada como pb, quando submetida a deslocamentos $d_i \leq x_j < 2d_i$, existe a probabilidade de intersecção com células das segunda e terceira escalas, como predito na equação CVDM. Entretanto, para a célula da terceira escala rotulada como pa, quando submetida a deslocamentos $d_i \leq x_j < 2d_i$, só existirá a possibilidade de intersecção com células da segunda escala. Para esta célula, só haverá probabilidade de intersecção com uma célula da primeira escala, para deslocamentos superiores a $3d_i$. Isto explica a razão pela

qual os valores de covariograma calculados pela equação CVDM, embora próximos, ainda se apresentam sistematicamente superiores aos valores medidos.

5.8. Resolução do Problema Inverso para CVDM

A solução do problema inverso para CVDM é dada por:

$$V_j = \left\{ \sum_{i=1}^{j-1} V_i \left[\left(1 - \frac{1}{2} \left(\varepsilon + \sum_{k=1}^n g_{ik} \right) \right) \left(\frac{1}{2^{j-i-1}} \right) \right] + \frac{1}{2} V_{j-1} \left(\sum_{k=1}^n g_{(j-1)k} - \varepsilon \right) - [C(x_{n-j}) - C(x_{n-j+1})] \right\} \cdot \left[-1/2 + (1/4)\varepsilon + (1/4) \sum_{k=1}^n g_{jk} \right]^{-1} \quad (5.35.)$$

Desta forma pode ser notada a necessidade de uma solução iterativa para a obtenção dos V_j a partir dos covariogramas. Deve ser estudado se um conjunto de valores de covariograma conduz a uma única distribuição de poros. Nesse momento, isto não será tentado, ficando para um futuro trabalho.

5.9. A Reconstituição em SME para a pasta de Ligantes

Procedeu-se a reconstituição em SME 2D da imagem da pasta de ligantes diretamente dos dados de fração de volumes (obtidos através da operação de abertura na imagem de 3200X, figura 2.2). Consideraram-se cinco classes de poros onde os menores poros (a quinta escala) apresentam diâmetros de 1250Å e os maiores poros (a primeira escala) de 20000Å. Efetuaram-se três gerações considerando-se redes de 1024x1024 células para a quinta classe. Na figura 5.7 mostram-se os resultados para as três gerações da distribuição acumulada de volumes de poros, medidas no SME reconstituído, em comparação com os valores originais medidos na imagem de 3200X.

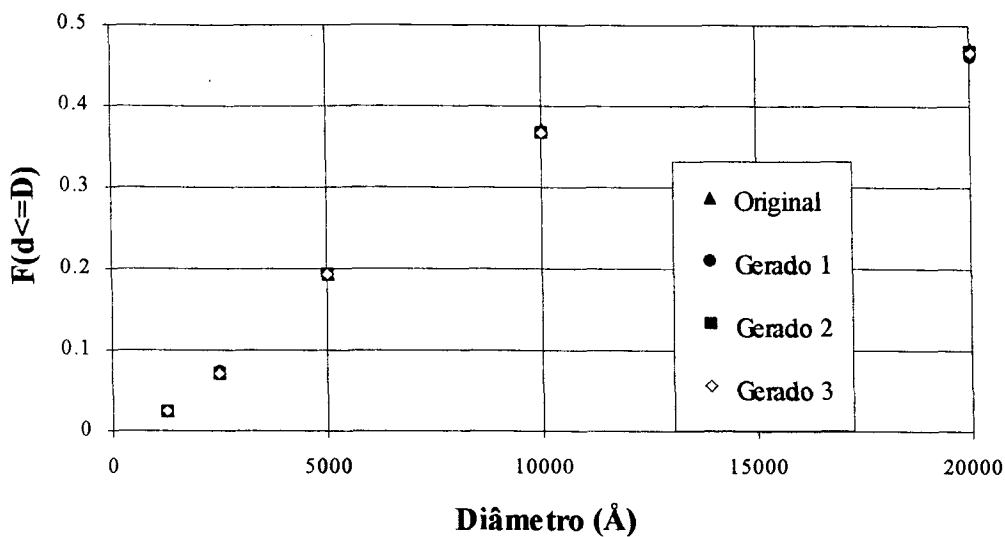


Figura 5.7. Comparação dos Volumes Gerados no SME 2D e Originais para imagem de 3200X com entrada por fração de volume.

Na figura 5.8 são mostrados os resultados de covariograma para as três gerações, medidos diretamente no SME reconstituído, em comparação com os valores medidos na imagem original de aumento de 3200X, figura 2.2.

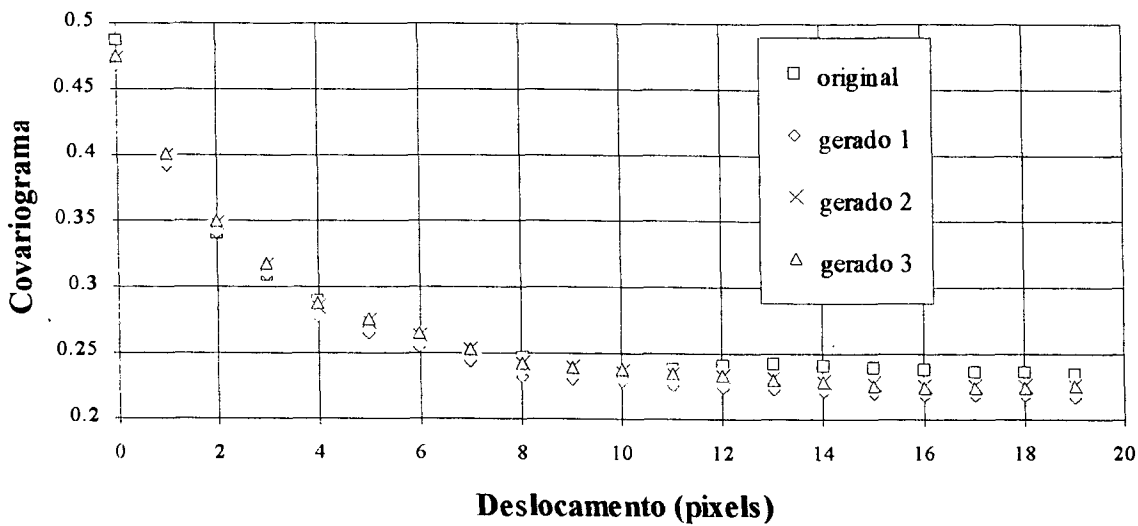


Figura 5.8. Comparação dos Covariogramas Gerados em SME 2D e Original com entrada por fração de volume. O pixel equivale a 1250 \AA .

O aspecto de uma imagem reconstituída em SME pode ser observado na figura 5.9, onde o processo foi efetuado para a imagem de 3200X com entrada de dados por fração de volumes e geradas as cinco escalas numa rede 512x512 células para a quinta escala.

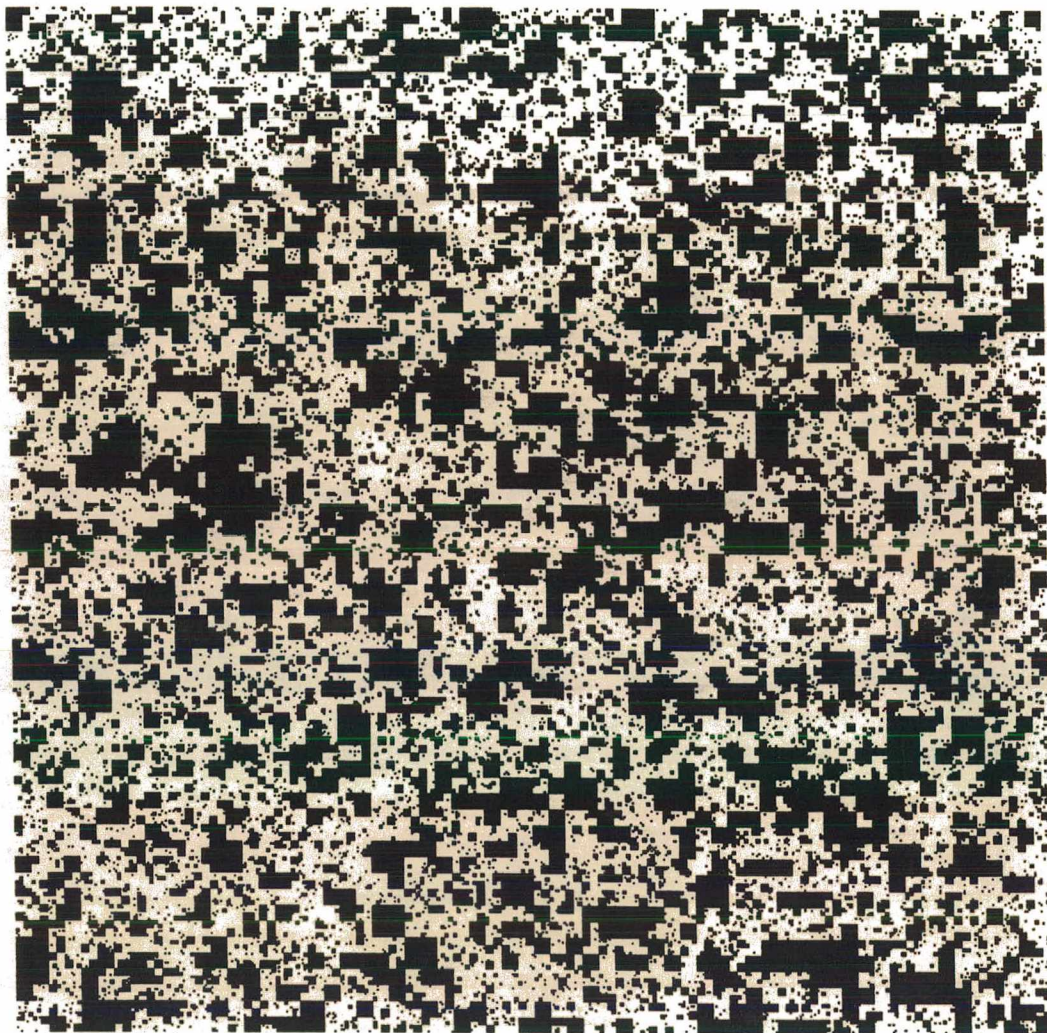


Figura 5.9. Um exemplo de Reconstituição em SME para a imagem de 3200X. O pixel vale 1250Å.

O aspecto da imagem de aumento de 3200X reconstituída em SME, figura 5.9, não se mostra como o da reconstituída pelo método de Joshi, figura 4.2. Deve ser levado em consideração que a reconstituição em SME é feita a nível das classes de poros, onde os poros de cada classe assumem a forma de um objeto quadrado, enquanto que no método de Joshi, a reconstituição é feita a nível de pixel. Deve ser lembrado, contudo, que a reconstituição em

SME, da imagem de aumento de 3200X, alimentada pelas frações de volume por classe, conserva as informações estatísticas de porosidade, distribuição acumulada de volume de poros bem como a função autocorrelação do espaço poroso.

A título de análise do comportamento do processo, uma imagem de areia de "Fontainebleau" — micrografia obtida por Laurindo (1992) — foi também reconstituída em SME diretamente das frações em volume (obtidas através da operação de abertura). Na figura 5.10 mostra-se a imagem binarizada desta areia, onde o pixel é de tamanho arbitrário. A imagem foi reconstituída em seis classes em redes 1024x1024 para a sexta escala.

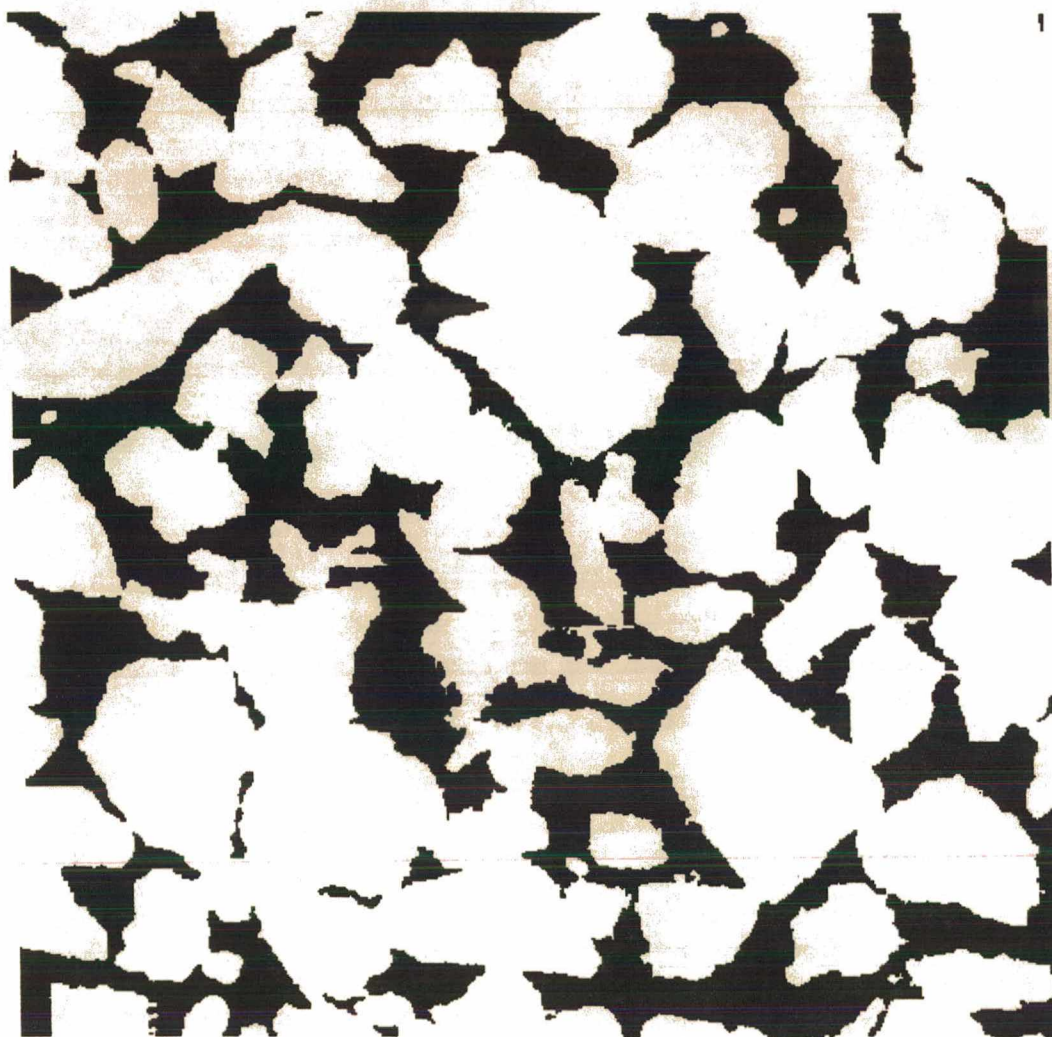


Figura 5.10. Imagem binária de uma areia de "Fontaneibleau". O espaço poroso é representado pela fase preta; os grãos de areia pela branca. O pixel é de tamanho arbitrário.

Nas figuras 5.11 e 5.12 são apresentados os resultados medidos no SME gerado, da distribuição de volumes e de covariograma, respectivamente, cotejados aos medidos na imagem original.

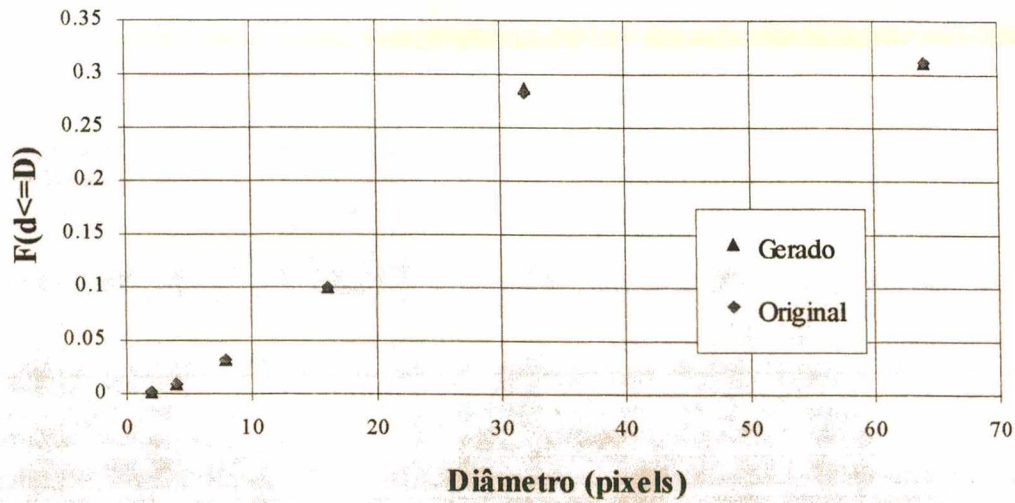


Figura 5.11. Os resultados de distribuição de poros original e gerado em SME para a areia de "Fontainebleau". Entrada por frações de volumes. Pixel de tamanho arbitrário.

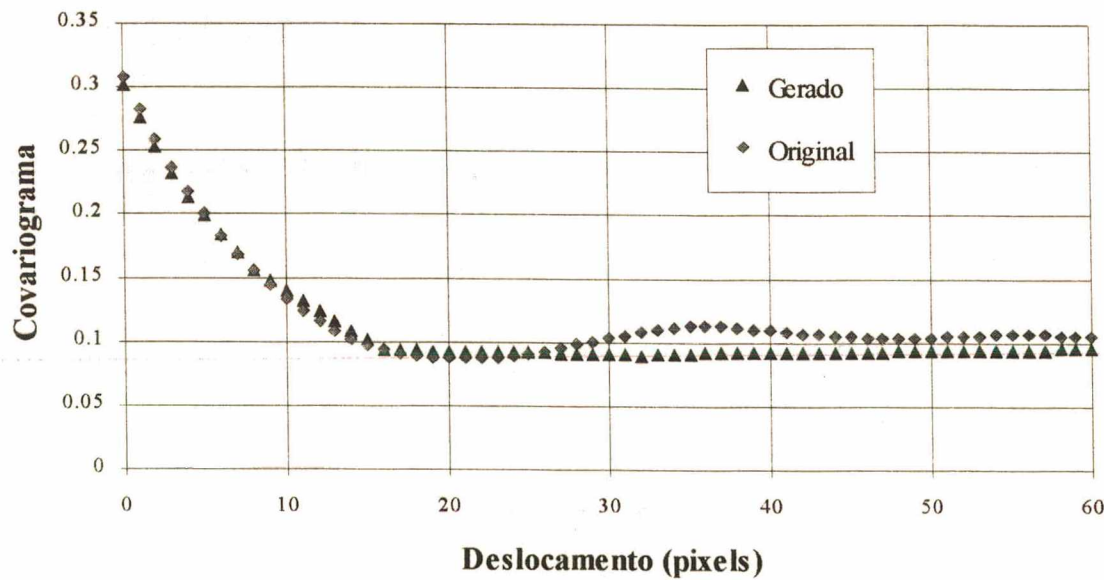


Figura 5.12. Os covariogramas original e gerado em SME para a areia de "Fontainebleau". Entrada por frações de volume. Pixel de tamanho arbitrário.

Em seguida, mesmo com os problemas já discutidos em relação à equação CVD, fez-se a tentativa de reconstituição a partir dos valores de covariograma medidos na imagem original. Realizaram-se novamente três gerações em redes de 1024x1024 células. Os resultados das distribuições de volumes gerados e original são mostrados na figura 5.13.

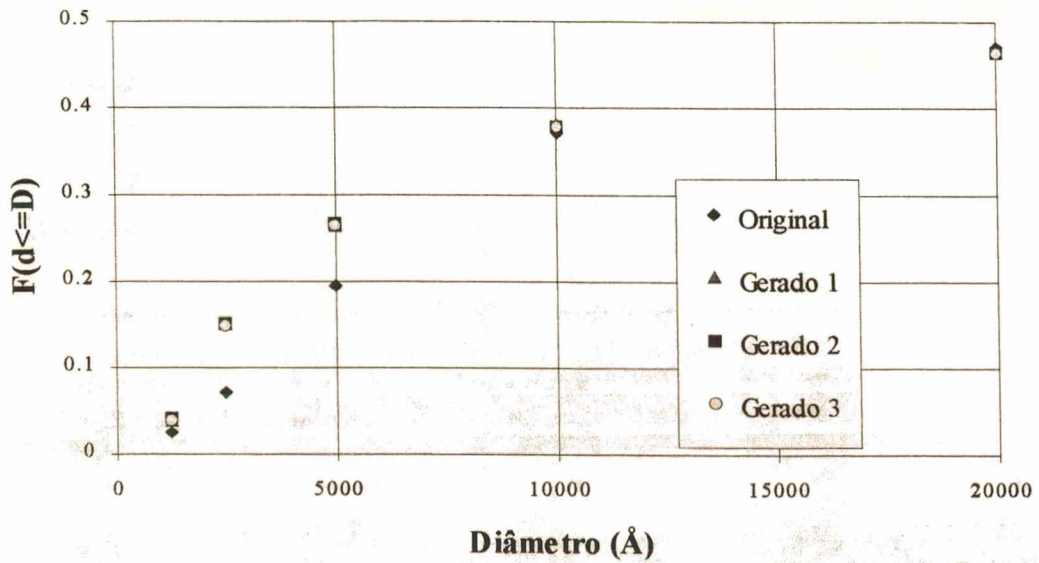


Figura 5.13. Comparação da distribuição de volumes original e gerada no SME 2D com entrada por covariograma.

A comparação entre os covariogramas gerados e original é mostrada na figura 5.14.

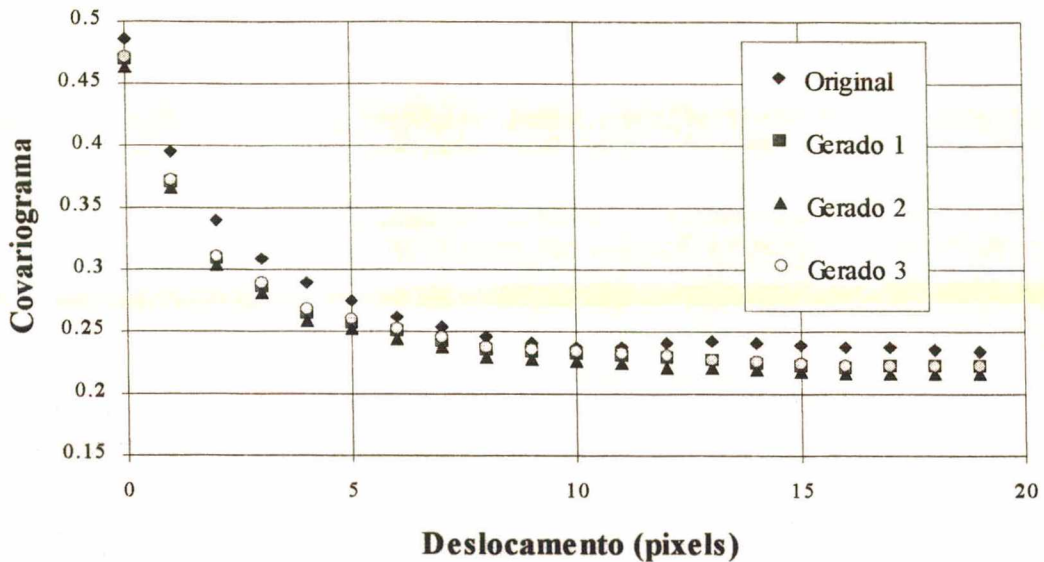


Figura 5.14. Os covariogramas gerados e original para a imagem de 3200X reconstituída 2D com entrada por covariograma. O pixel equivale a 1250Å.

5.9.1. Conclusões Acerca dos Resultados Obtidos na Reconstituição em SME para a Imagem da Pasta de Ligantes

Como visto, pode-se proceder a reconstituição em SME, conhecendo-se a fração de volumes de poros por classe, ou a função covariograma. No primeiro caso, o SME é gerado, ocupando-se diretamente cada escala i com as proporções p_i . Alimentando-se o processo com os valores de covariograma, deve-se resolver a equação CVD, ou a CVDM, para a obtenção dos valores v_i , de fração de volume por classe, o que possibilitará ocupar cada escala com a requerida proporção p_i . Em ambos os casos, deseja-se analisar no sistema reconstituído, o comportamento dos parâmetros: porosidade, função distribuição de poros e função covariograma.

Analisa-se inicialmente, o comportamento do SME reconstituído, para a imagem de aumento de 3200X, quando os dados de entrada no processo são constituídos pelos valores de covariograma medidos na imagem original. Na figura 5.14 observa-se a comparação dos valores de covariograma medidos na imagem original e reconstituída, e nós podemos dizer que a função covariograma é razoavelmente bem reproduzida. Contudo, os valores da distribuição acumulada de volumes de poros, figura 5.13, para as classes de diâmetros de poros de 2500Å e de 5000Å,

medidos no sistema gerado se afastam daqueles valores originais, medidos na imagem de aumento de 3200X.

Nós atribuímos este fato a duas questões. Primeiramente, deve ser lembrado a deficiência que apresenta a equação CVD. A segunda questão diz respeito ao fato de que a equação CVD apresenta uma razoável sensibilidade no valor calculado da fração de volume v_i , quando de uma variação na diferença dos valores de covariograma de entrada. De fato, pode ser notado na equação CVD, equação (5.18.), que para porosidades de, por exemplo, 0.5, uma variação na diferença dos covariogramas de entrada multiplica por um fator quatro a variação na fração de volume v_i .

Um estudo adicional deve ser realizado, na tentativa de resolução do problema inverso para a equação CVDM. Isto feito, torna-se possível a ocorrência de uma sensível melhoria nos valores de distribuição de volumes de poros e de covariograma, de forma a satisfazer os valores de imagens originais.

A reconstituição em SME, tendo as frações de volume por classe, como dados de entrada, apresenta um comportamento, para as imagens analisadas acima, bastante bom. Na figura 5.7 pode ser notada a excelente concordância das distribuições acumuladas de volume de poros medidas nas imagens original e reconstituída. Esta concordância deve ser esperada, uma vez que as frações de volume geradas dependem fundamentalmente do tamanho de rede e do gerador de números aleatórios, que demonstrou trabalhar bastante bem. A concordância é também muito boa para os valores de covariograma, medido na imagem original da pasta de ligantes, e na imagem associada reconstituída, figuras 5.8.

Este resultado é muito interessante, uma vez que os SME foram gerados apenas com o conhecimento das frações de volume medidas na imagem original. Isto significa que a composição das várias escalas i (que foram ocupadas aleatoriamente com proporções p_i), conduz, para a referida imagem, a uma correlação (intrínseca ao processo de reconstituição) que é a mesma da imagem original. Este comportamento apresentado pelas imagens reconstituídas da pasta de ligantes se repete, quando se reconstitui a imagem da areia de "Fontainebleau", figura 5.10. As comparações dos valores de distribuição de poros e de

covariogramas, nas imagens original e gerada, para esta areia, podem ser observadas nas figuras 5.11. e 5.12., respectivamente.

Vem agora a questão: qual é a razão de as referidas imagens, reconstituídas em SME diretamente das frações de volume por classe, apresentarem uma função covariograma (após a composição das escalas) que satisfaz aquela da imagem original?

Esta talvez seja uma questão de resposta não simples, e nos limitamos a alguns comentários informais sem fundamentação teórica. Primeiramente deve ser notado que a boa concordância dos covariogramas, nas imagens original e reconstituída em SME diretamente das frações de volume, ocorre para as imagens da pasta de ligantes e da areia de "Fontainebleau", que são meios considerados orbiculares. De fato, em meios filiformes, como a imagem de aumento de 200X da argamassa, o mesmo não ocorrerá, como poderá ser visto na próxima seção.

A distribuição de poros é obtida com a operação de abertura, que como observado no final da seção 2.6., separa cada objeto conexo por classes de diâmetro. Assim, a operação de abertura se comporta, no que toca à separação das classes, da mesma forma que o SME. Adicionalmente, deve-se dizer que é bastante provável, que os poros separados por cada classe de diâmetro na imagem original, se distribuam espacialmente de forma aleatória, ou ao menos com fraca correlação espacial (correlação a nível do poro de cada classe). Isto significa que a correlação das imagens da pasta de ligantes e da areia de "Fontainebleau" são oriundas da superposição das várias classes de diâmetro de poros, da mesma forma como no SME, veja-se seção 5.5.

Com estas considerações, de separação por classes de diâmetros de poros com distribuição espacial aleatória por classes na imagem original, quando da reconstituição em SME com entrada por frações de volume das classes (dispostas aleatoriamente) e após a superposição das escalas, o SME deve recuperar a função covariograma da imagem original.

5.10. Reconstituição em SME para a Imagem de 200X (Rede de Fissuras)

A imagem de 200X foi reconstituída diretamente dos dados de fração de volumes considerando-se quatro classes onde na quarta escala tem-se poros de 25000Å de diâmetro e na primeira escala poros de 20µm. A rede utilizada é de 1024x1024 pixels para a quarta escala.

Nas figuras 5.15 e 5.16 são apresentados os resultados da distribuição acumulada de volume e do covariograma, respectivamente, em comparação com aqueles medidos na imagem original.

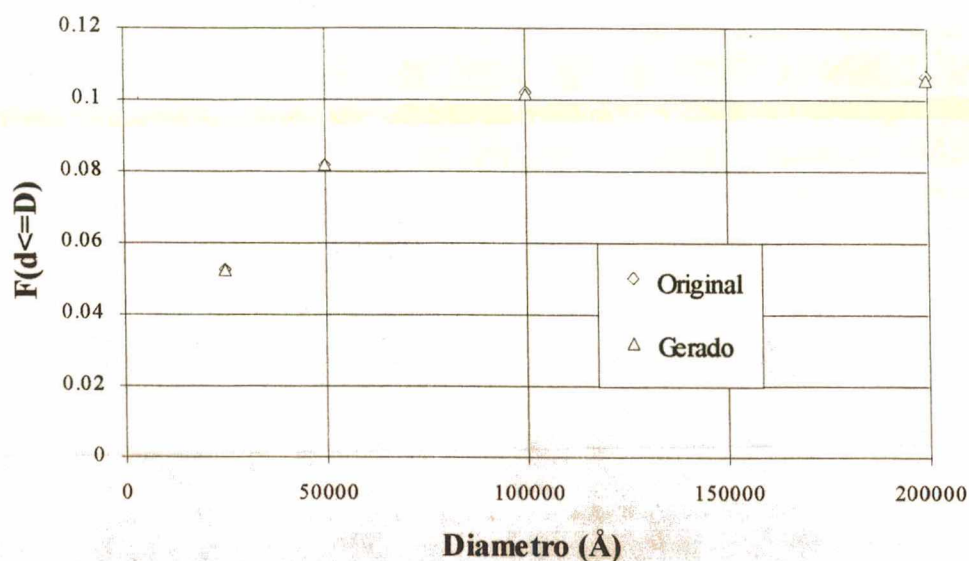


Figura 5.15. As distribuições de volumes original e gerada para a reconstituição SME da imagem de 200X. Entrada por volume.

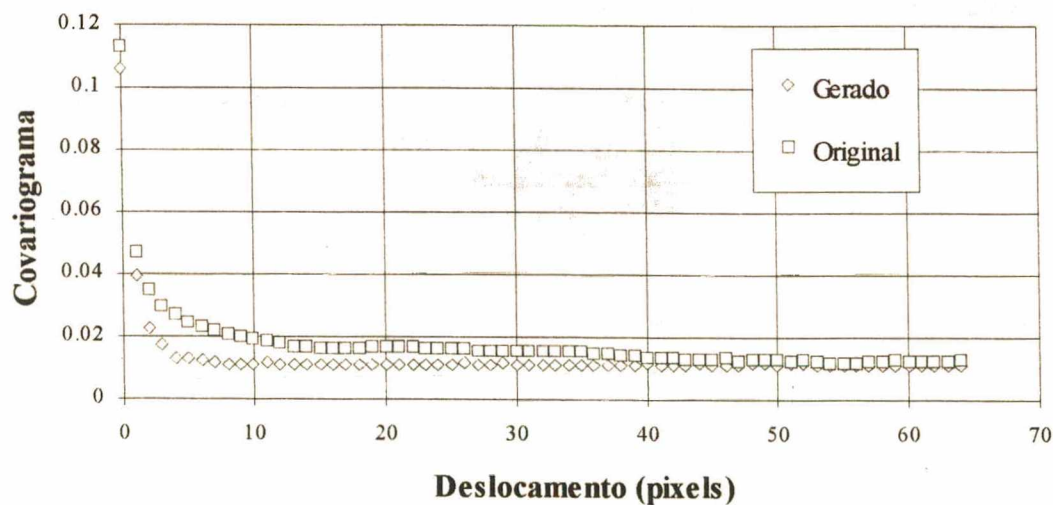


Figura 5.16. Os covariogramas gerado e original para a reconstituição em SME da imagem de 200X. Entrada por volume. O pixel equivale a 25000 \AA .

Depois, realizou-se a reconstituição a partir dos dados de covariograma. Considerou-se para este caso $x_1=2$ pixels (25000\AA) e $x_n=64$ pixels ($80\mu\text{m}$) o que equivale à geração de um SME com seis classes. A comparação dos valores de distribuição de volumes e covariogramas gerado e original é mostrada nas figuras 5.17 e 5.18, respectivamente.

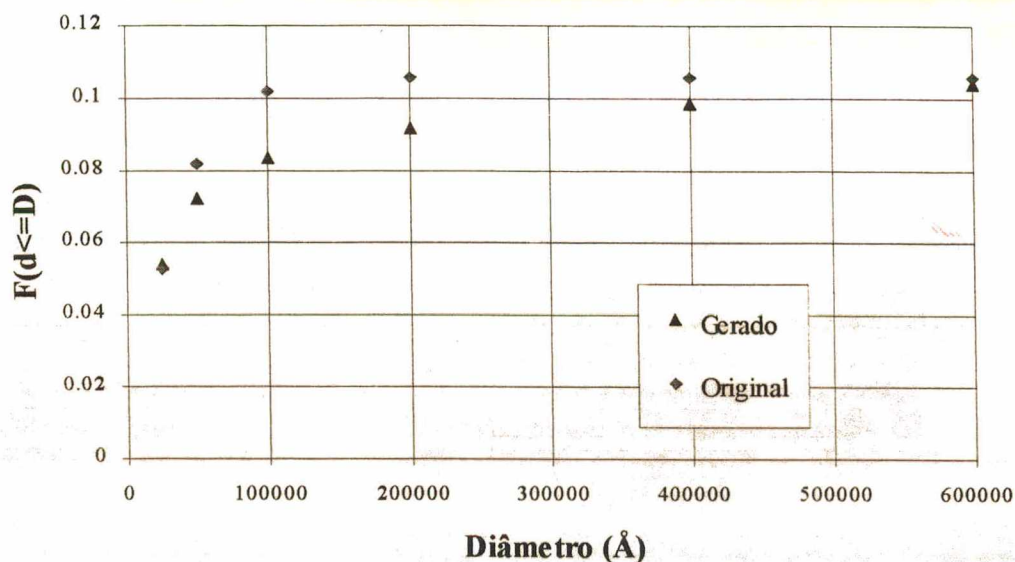


Figura 5.17. As distribuições de volume original e gerada em SME para a imagem de 200X. Entrada por covariograma.

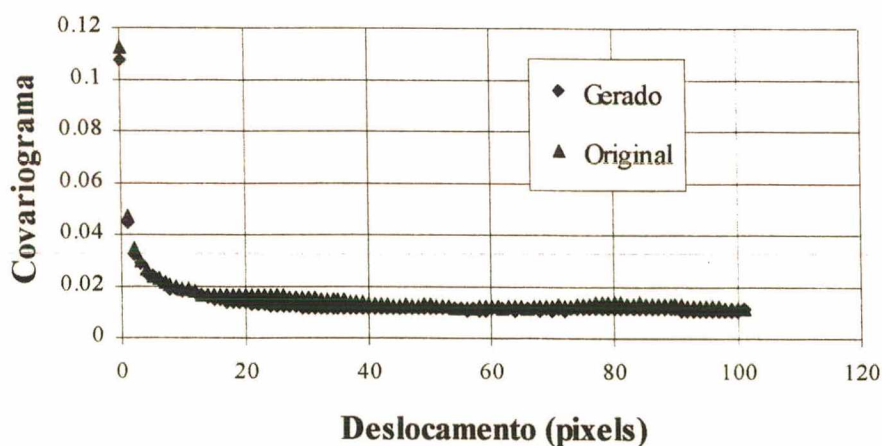


Figura 5.18 Os covariogramas original e gerado no SME para a imagem de 200X. Entrada por Covariograma. O pixel equivale a 25000\AA

Na figura 5.19 mostra-se o aspecto da imagem de 200X reconstituída em SME com entrada por volumes. O aspecto da reconstituição com entrada por covariograma é parecido com a imagem da figura 5.19.



Figura 5.19. O aspecto de uma reconstituição em SME para a imagem de 200X.

5.10.1. Conclusões para a Reconstituição em SME da Imagem de Aumento de 200X.

Para a imagem de aumento de 200X, a escala das fissuras, reconstituída em SME diretamente das frações de volume por classe, tem-se, como para a imagem da pasta de ligantes, uma excelente concordância entre a distribuição de volumes de poros medida na imagem gerada e na imagem original (como dito anteriormente isto depende basicamente do tamanho de rede e do gerador de números aleatórios). Contudo, diferentemente da imagem da pasta de ligantes, o

mesmo não ocorre para a função covariograma, mas este é um comportamento que corresponde ao esperado. De fato, a imagem de aumento de 200X é um meio filiforme, onde a operação de abertura capta a largura de uma fissura como sendo o seu diâmetro. Desta forma, quando da reconstituição em SME, a fração de volumes associada às fissuras será atribuída a uma classe de poros, de diâmetros equivalentes à largura das fissuras, que é disposta aleatoriamente na escala correspondente em objetos de forma geométrica quadrada. Quer dizer, considerando-se apenas uma fissura, imaginada de largura (diâmetro) igual a L_f e de comprimento C_f , o que fornece um volume $V = L_f \cdot C_f$, ela será, quando da reconstituição em SME, separada em C_f/L_f quadrados de lado L_f , de forma a manter o volume V , onde estas células quadradas serão dispostas aleatoriamente no SME, veja-se ilustração na figura 5.20.

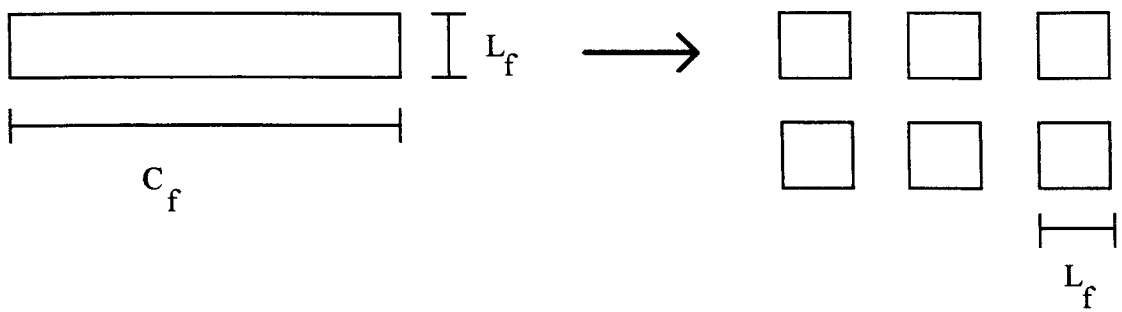


Figura 5.20. A reconstituição de uma fissura em SME. O retângulo original é separado em vários quadrados de lado igual a L_f .

O efeito ilustrado na figura 5.20 pode ser observado na imagem reconstituída da escala de fissuras, figura 5.19.

Saliente-se, que para imagens orbiculares, a transformação de objetos originais em objetos de forma quadrada no SME, não tem efeito drástico, uma vez que os objetos da imagem original melhor se aproximam de círculos.

Ora, a transformação das fissuras em vários quadrados no SME, mesmo mantendo a fração de volume, implica em uma diminuição do alcance de correlação a nível dos objetos, quer dizer, cada quadrado isoladamente é um objeto mais compacto. Isto pode ser observado

experimentalmente na figura 5.16, onde o covariograma da imagem gerada em SME, apresenta valores inferiores ao da imagem original, para cada valor de deslocamento.

Quanto à reconstituição da imagem de aumento de 200X, com entrada de dados por covariograma, muito embora o processo tenda a reproduzir os valores de covariograma, veja-se figura 5.18, a distribuição de poros não é bem mantida. Aqui existem os mesmos problemas já comentados sobre a equação CVD, e provavelmente a questão de a função covariograma não ser suficiente para reconstituir meios filiformes, como já comentado na seção 4.4., acerca do método de reconstituição de Joshi.

5.11. Covariograma Total da Composição de duas Escalas

Em materiais com distribuição de poros larga, torna-se bastante difícil (senão impossível) a descrição de todo o espectro poroso em uma única micrografia, captando os detalhes dos pequenos poros, convivendo com os grandes poros. Faz-se então a separação do espectro poroso em escalas, cada escala com um tamanho característico. Assim, considera-se uma dada escala descrevendo uma parte do espectro poroso, convivendo com uma fase cinza, que deverá ser observada em uma outra escala (de comprimento característico menor).

Por outro lado, os covariogramas das escalas em separado são facilmente obtidos. Surge então a questão envolvendo a possibilidade de conhecimento do covariograma associado à composição das escalas. Dito de outra forma, procura-se obter o covariograma da maior escala (maior comprimento característico), levando-se em conta a sua fase cinza, representada pela menor escala (de menor comprimento característico).

Dada esta questão, propõe-se aqui um modelo que permita a obtenção do covariograma total das duas escalas, conhecendo-se os covariogramas de cada escala separadamente.

Para tanto, considere-se o modelo estrutural mostrado na figura 5.21. Na maior escala, denotada por α , de tamanho linear de célula elementar u_α , coexistem a fase porosa (p), a fase sólida (s) e uma fase cinza (c). A fase cinza na escala α é admitida ser representada por uma outra escala β , que possui um tamanho de célula elementar u_β . Considera-se aqui, que o tamanho de célula u_α forneça uma escala β , estatisticamente representativa. Isto significa, que a

escala β , quando observada da escala α , constitui um meio homogêneo, o que implica que deve-se ter a relação $u_\beta/u_\alpha \ll 1$.

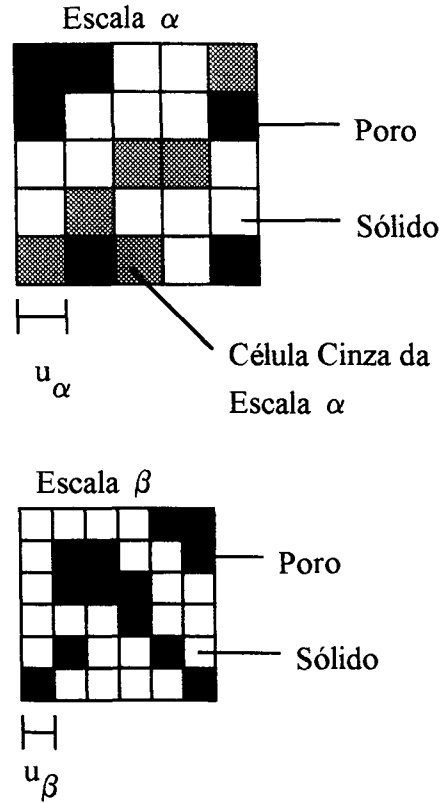


Figura 5.21. Modelo estrutural para a composição de covariogramas.

Assume-se, também, que toda célula cinza da escala α é estatisticamente a mesma, sendo sempre representada pela mesma escala β . Considerando-se as escalas α e β separadamente, conhece-se os parâmetros: ε_p^α e ε_p^β , as porosidades (fração de volume de poro nas escalas α e β , respectivamente); ε_c^α , a fração de cinzas na escala α ; C_{pp}^α , C_{cc}^α e C_{pc}^α , os covariogramas (intersecções) de poro com poro, cinza com cinza, e poro com cinza na escala α , respectivamente; e finalmente C_{pp}^β , o covariograma de poro com poro na escala β .

Inicialmente se desenvolverá o modelo, considerando-se as três fases na escala α e duas na escala β . Posteriormente, se assumirá o caso particular de duas fases (poros e cinzas) na escala α . Também, primeiro se obterá uma equação para o covariograma total, considerando-se

deslocamentos múltiplos de u_α , e depois deslocamentos múltiplos de u_β , até um máximo de u_α .

Para deslocamentos nu_α , $n=0, 1, 2, \dots$ se terá intersecções de células (p) com (p), células (c) com (c), e células (p) com (c), todas da escala α . Os volumes de intersecção que se somarão para formar o covariograma total do espaço poroso, C_{pp}^T , serão:

- i) células (p) com (p): o próprio covariograma poro com poro, $C_{pp}^\alpha(nu_\alpha)$, medido para a escala α ;
- ii) células (c) com (c): a intersecção será $C_{cc}^\alpha(nu_\alpha)\varepsilon_p^\beta$, uma vez que quando uma célula cinza encontra outra célula cinza na escala α , a intersecção deverá ser multiplicada por ε_p^β ;
- iii) intersecção de células (p) com (c): $2C_{pc}^\alpha(nu_\alpha)\varepsilon_p^\beta$. Aqui, deve ser lembrado que o fator 2 é levado em conta uma vez que se terão intersecções de células (p) com (c) e de células (c) com (p).

Assim, para deslocamentos nu_α , o covariograma total será dado por:

$$C_{pp}^T(nu_\alpha) = C_{pp}^\alpha(nu_\alpha) + C_{cc}^\alpha(nu_\alpha)\varepsilon_p^\beta + 2C_{pc}^\alpha(nu_\alpha)\varepsilon_p^\beta \quad (5.36.)$$

Mais tarde, quando se considerar a equação (5.36.) para o caso particular de duas fases na escala α , se fará a verificação dos valores fornecidos para deslocamentos $nu_\alpha = 0$ e $nu_\alpha \rightarrow \infty$.

Para o caso de deslocamentos múltiplos de u_β , nu_β , os valores de intersecção serão:

- i) células (p) com (p):

- ia) intersecção da célula com ela mesma:

$$\varepsilon_p^\alpha \left(\frac{u_\alpha - nu_\beta}{u_\alpha} \right) \quad (5.37.)$$

ib) intersecção da célula (p) com outra (p) distinta:

$$C_{pp}^{\alpha}(u_{\alpha}) \frac{nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \quad (5.38.)$$

ii) células (c) com (c):

ïia) intersecção com ela mesma:

$$C_{pp}^{\beta}(nu_{\beta}) \left[\frac{u_{\alpha} - nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \right] \varepsilon_c^{\alpha} \quad (5.39.)$$

ïib) com outra distinta:

$$C_{cc}^{\alpha}(nu_{\alpha}) C_{pp}^{\beta}(u_{\alpha} - nu_{\beta}) \frac{nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \quad (5.40.)$$

iii) intersecção de (p) com (c):

$$2C_{pc}^{\alpha}(u_{\alpha}) \varepsilon_p^{\beta} \frac{nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \quad (5.41.)$$

Assim, o covariograma total para deslocamentos $nu_{\beta} \leq u_{\alpha}$, será dado por:

$$\begin{aligned} C_{pp}^T(nu_{\beta}) &= \varepsilon_p^{\alpha} \left(\frac{u_{\alpha} - nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \right) + C_{pp}^{\alpha}(u_{\alpha}) \frac{nu_{\beta}}{u_{\alpha}} + C_{pp}^{\beta}(nu_{\beta}) \left(\frac{u_{\alpha} - nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \right) \varepsilon_c^{\alpha} + \\ &+ C_{cc}^{\alpha}(u_{\alpha}) C_{pp}^{\beta}(u_{\alpha} - nu_{\beta}) \frac{nu_{\beta}}{u_{\alpha}} + 2C_{pc}^{\alpha}(u_{\alpha}) \varepsilon_p^{\beta} \frac{nu_{\beta}}{u_{\alpha}} \end{aligned} \quad (5.42.)$$

5.11.1. Covariograma Total Para o Caso Particular de Imagens a Duas Fases

Considere-se agora o caso em que a escala α é binária, no sentido de apresentar apenas as fases associadas a poros e cinzas, inexistindo a fase sólida. Define-se, como já feito na seção 2.4., a função de fase $P(\mathbf{x})$, aqui reescrita:

$$P(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence ao espaço poroso} \\ 0, & \text{se não} \end{cases}$$

Uma função de fase complementar, $\bar{P}(\mathbf{x})$, é também definida como:

$$\bar{P}(\mathbf{x}) = 1 - P(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \text{se } \mathbf{x} \text{ pertence ao espaço poroso} \\ 1, & \text{se não} \end{cases} \quad (5.43.)$$

dessa forma, têm-se:

$\langle P(\mathbf{x}) \rangle = \varepsilon$, denotando a fração de volume associada ao espaço poroso, a porosidade;

$\langle \bar{P}(\mathbf{x}) \rangle = \langle 1 - P(\mathbf{x}) \rangle = 1 - \varepsilon$, a fração de volume associada à fase cinza.

O covariograma do espaço poroso será, como já visto na seção 2.4., para um dado deslocamento u :

$$C_{pp}(u) = \langle P(x_1, x_2) P(x_1 + u, x_2) \rangle$$

Para a fase cinza, o covariograma se escreve:

$$\begin{aligned} C_{cc}(u) &= \langle \bar{P}(x_1, x_2) \bar{P}(x_1 + u, x_2) \rangle = \langle [1 - P(x_1, x_2)][1 - P(x_1 + u, x_2)] \rangle \\ C_{cc}(u) &= \langle 1 - P(x_1 + u, x_2) - P(x_1, x_2) + P(x_1, x_2) P(x_1 + u, x_2) \rangle \\ C_{cc}(u) &= 1 - 2\varepsilon + C_{pp}(u) \end{aligned} \quad (5.44.)$$

O covariograma cruzado, $C_{pc}(u)$, será dado por:

$$\begin{aligned} C_{pc}(u) &= \langle P(x_1, x_2) \bar{P}(x_1 + u, x_2) \rangle = \langle P(x_1, x_2) [1 - P(x_1 + u, x_2)] \rangle \\ C_{pc}(u) &= \langle P(x_1, x_2) - P(x_1, x_2) P(x_1 + u, x_2) \rangle = \varepsilon - C_{pp}(u) \end{aligned} \quad (5.45.)$$

As equações (5.44.) e (5.45.) são agora utilizadas nas equações (5.36.) e (5.42.) para se considerar o caso da escala α a duas fases. Assim fazendo, a equação (5.36.) se torna:

$$C_{pp}^T(nu_\alpha) = C_{pp}^\alpha(nu_\alpha)(1 - \varepsilon_p^\beta) + \varepsilon_p^\beta \quad (5.46.)$$

Procede-se a verificação para deslocamentos $nu_\alpha = 0$ e $nu_\alpha \rightarrow \infty$. Ora, para $nu_\alpha = 0$, tem-se que $C_{pp}^\alpha(nu_\alpha = 0) = \varepsilon_p^\alpha$, donde:

$$C_{pp}^T(nu_\alpha = 0) = \varepsilon_p^\alpha(1 - \varepsilon_p^\beta) + \varepsilon_p^\beta = \varepsilon_p^\alpha + \varepsilon_p^\beta(1 - \varepsilon_p^\alpha) = \varepsilon_p^\alpha + \varepsilon_p^\beta \varepsilon_c^\alpha \quad (5.47.)$$

Dessa forma, recupera-se o valor de porosidade das escalas compostas, denotada ε_p^T .

Deseja-se agora, verificar se a equação (5.36.) fornece o resultado $(\varepsilon_p^T)^2$ para deslocamentos $nu_\alpha \rightarrow \infty$. Visto que $C_{pp}^\alpha(nu_\alpha \rightarrow \infty) = (\varepsilon_p^\alpha)^2$, tem-se:

$$C_{pp}^T(nu_\alpha \rightarrow \infty) = (\varepsilon_p^\alpha)^2(1 - \varepsilon_p^\beta) + \varepsilon_p^\beta \quad (5.48.)$$

mas,

$$(\varepsilon_p^T)^2 = [\varepsilon_p^\alpha + \varepsilon_p^\beta(1 - \varepsilon_p^\alpha)]^2 = (\varepsilon_p^\alpha)^2[1 - \varepsilon_p^\beta] + \varepsilon_p^\beta \quad (5.49.)$$

de maneira que $C_{pp}^T(nu_\alpha \rightarrow \infty) = (\varepsilon_p^T)^2$.

A equação (5.42.) para o caso de escala α a duas fases, se torna:

$$C_{pp}^T(nu_\beta) = \varepsilon_p^\alpha \left(\frac{u_\alpha - nu_\beta}{u_\alpha} \right) + C_{pp}^\alpha(u_\alpha) \frac{nu_\beta}{u_\alpha} + C_{pp}^\beta(nu_\beta) \left(\frac{u_\alpha - nu_\beta}{u_\alpha} \right) (1 - \varepsilon_p^\alpha) + \\ + [1 - 2\varepsilon_p^\alpha + C_{pp}^\alpha(u_\alpha)] C_{pp}^\beta(u_\alpha nu_\beta) \left(\frac{nu_\beta}{u_\alpha} \right) + 2[\varepsilon_p^\alpha - C_{pp}^\alpha(u_\alpha)] \varepsilon_p^\beta \left(\frac{nu_\beta}{u_\alpha} \right) \quad (5.50.)$$

Para $nu_\beta = 0$ tem-se:

$$C_{pp}^T(nu_\beta = 0) = \varepsilon_p^\alpha + \varepsilon_p^\beta (1 - \varepsilon_p^\alpha) \quad (5.51.)$$

Assim, a equação (5.51.) fornece o mesmo resultado que a equação (5.47.), para $C_{pp}^T(nu_\alpha = 0)$.

Para $nu_\beta = u_\alpha$, se terá:

$$C_{pp}^T(nu_\beta = u_\alpha) = C_{pp}^\alpha(u_\alpha) + [1 - 2\varepsilon_p^\alpha + C_{pp}^\alpha(u_\alpha)] \varepsilon_p^\beta + 2\varepsilon_p^\beta [\varepsilon_p^\alpha - C_{pp}^\alpha(u_\alpha)] \\ C_{pp}^T(nu_\beta = u_\alpha) = C_{pp}^\alpha(u_\alpha) (1 - \varepsilon_p^\beta) + \varepsilon_p^\beta \quad (5.52.)$$

A equação anterior recupera o resultado de $C_{pp}^T(nu_\alpha = u_\alpha)$, mostrado na equação (5.46.).

5.12. Considerações Acerca do Covariograma Total da Composição de Duas Escalas

Este trabalho colocou a questão da obtenção do covariograma total da composição de duas escalas, objetivando a possível reconstituição de estruturas porosas com larga distribuição de poros (onde se faz necessária, *a priori*, a separação de escalas). A idéia seria a reconstituição de todo o espectro poroso, por exemplo, pelo método de Joshi (visto no capítulo 4), ou em SME, a partir dos dados de covariograma total. Dessa forma, a despeito do tamanho de rede que seria necessário, se conseguiria reconstruir todo um espectro poroso com larga distribuição de poros. Com o método de Joshi, parece existir uma possibilidade de reconstituição a partir do

covariograma total. Contudo, não se pode utilizar o covariograma total para reconstituições em SME. De fato, nesse caso as células que seriam geradas, a partir dos deslocamentos u_β , $2u_\beta$, $4u_\beta$, ... seriam dispostas homogeneamente por todo o sistema, e não agrupadas em células de tamanho u_α .

Algumas questões conceituais são consideradas, envolvendo o modelo estrutural assumido, figura 5.20, bem como as equações derivadas. As equações para o covariograma total, (5.36.) e (5.42.), respectivamente para deslocamentos múltiplos de u_α e u_β , parecem se apresentar matematicamente consistentes. Entretanto, do ponto de vista conceitual deve ser lembrado que a escala β se constitui num meio homogêneo quando "vista" da escala α . No que se refere à equação (5.36.), para deslocamentos múltiplos de u_α , acredita-se que essa consideração não implica em um problema. De fato, para deslocamentos múltiplos de u_α , a única informação concernente à escala β no covariograma total é a porosidade, que se traduz em uma informação de homogeneidade. O problema conceitual ocorre quando se consideram deslocamentos no sistema composto múltiplos de u_β . Nós assim acreditamos, uma vez que se está agora incluindo na equação (5.42.) informações de heterogeneidade da escala β , traduzidas pelo covariograma $C_{pp}^\beta(nu_\beta)$, escala esta que é homogênea quando vista da escala α .

Outra questão se refere à dimensão fractal da escala composta, caso o meio se apresente fractal a partir de comprimentos de escala associados à escala β , até comprimentos na escala α . Os covariogramas C_{pp}^α e C_{pp}^β nos fornecem a dimensão fractal das escalas em separado. Contudo, o covariograma total para deslocamentos múltiplos de u_α , não conseguirá prever a dimensão fractal do sistema composto, uma vez que esta equação incorpora apenas informações de homogeneidade da escala β . Isto quer dizer que a composição da escala β à escala α não introduz irregularidades. Subtraindo-se do covariograma total a informação de homogeneidade, ε_p^β , vem que $C_{pp}^T(nu_\alpha) - \varepsilon_p^\beta = C_{pp}^\alpha(nu_\alpha)(1 - \varepsilon_p^\beta)$, e dessa forma se $C_{pp}^\alpha(nu_\alpha) \propto (nu_\alpha)^{-\lambda}$, tem-se que $C_{pp}^T(nu_\alpha) - \varepsilon_p^\beta \propto (nu_\alpha)^{-\lambda}$.

5.13. Conclusões

A reconstituição de espaços porosos em SME se apresenta realizável, sendo reproduzidos os parâmetros estatísticos de porosidade, função distribuição de poros e covariograma. Isto

ocorre para meios orbiculares tendo como dados de entrada no processo de reconstituição as frações de volume por classe de poros. Para meios orbiculares, tendo-se como dados de entrada os valores de covariograma, a equação CVD, em razão dos problemas apresentados, conduz a resultados não muito satisfatórios. Este trabalho sugere que a solução do problema inverso para a equação CVDM permitirá a obtenção de melhores resultados.

A reconstituição de meios filiformes em SME não se apresenta adequada, devido ao fato de uma fissura ser separada em vários quadrados, a serem dispostos aleatoriamente na escala associada ao seu diâmetro (largura). Especialmente para este caso, é possível que uma reformulação no processo construtivo do SME, de forma a considerar a geração de cada escala espacialmente correlacionada, permita uma reconstrução das fissuras. De fato, a geração dos quadrados com correlação espacial na dada escala os disporia de forma que sua composição recuperaria a geometria de uma fissura.

CAPÍTULO 6

PROCESSOS DE INVASÃO DE FLUIDO NÃO-MOLHANTE EM SISTEMAS MULTIESCALAS

6.1. Introdução

Neste capítulo, estudam-se processos de invasão de fluido não-molhante na estrutura porosa da pasta de ligantes, reconstituída em sistema multiescala (SME). A atenção é voltada para o fenômeno de intrusão de mercúrio, observando-se que a invasão de ar em processos de dessorção de vapor de água é completamente análoga.

O estudo aqui realizado consiste na caracterização do comportamento do mercúrio frente à estrutura porosa, em amostras inicialmente submetidas à vácuo, na condição de equilíbrio, sem se preocupar com os aspectos dinâmicos do processo. O que se pretende é a obtenção da curva de intrusão de mercúrio no espaço poroso em função da pressão capilar ou do diâmetro dos poros.

6.2. Fundamentos

A intrusão de mercúrio nos poros de um material é fundamentada na lei de capilaridade (lei de Young-Laplace), dada por:

$$P_l - P_g = P_{cap} = - \frac{2 \sigma \cos \alpha}{r} \quad (6.1.)$$

onde: P_l é a pressão do fluido não-molhante (o mercúrio); P_g é a pressão do fluido molhante, o ar, que é desprezada uma vez que o material é submetido inicialmente ao vácuo; P_{cap} é a pressão capilar; σ é a tensão superficial do mercúrio; α é o ângulo de contacto entre a interface do mercúrio e o sólido; r é o raio do poro.

O mercúrio não "molha" a matriz sólida do material, de forma que ele só poderá atravessar (invadir) uma passagem no espaço poroso se o raio r da passagem for suficientemente grande, de tal forma que a pressão P_{cap} seja menor ou igual à pressão de intrusão do mercúrio, P_{itr} , veja-se ilustração na figura 6.1.

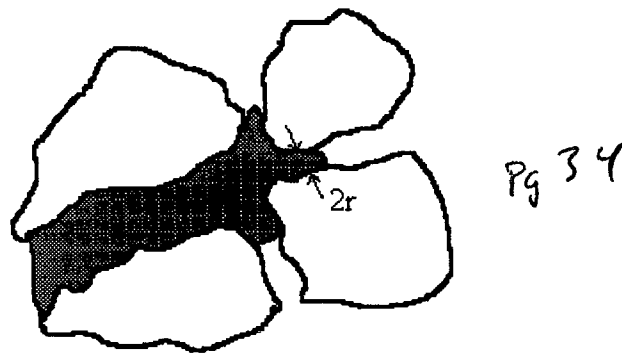


Figura 6.1. A intrusão de mercúrio no espaço poroso. Para atravessar a passagem de diâmetro $2r$, é necessário que a pressão de mercúrio seja superior ou igual a P_{cap} , a qual é inversamente proporcional a r .

A uma pressão P_{itr} imposta, o mercúrio penetra nos poros de raio r que satisfaçam a condição $P_{itr} \geq P_{cap}$ e que possuam um caminho no espaço poroso com continuidade da fase de mercúrio. Dessa forma, o processo de invasão de mercúrio pode ser considerado equivalente a um problema de percolação, onde se deve procurar o agrupamento (ilha) percolante em contacto com a superfície de intrusão de mercúrio.

Sumarizando, o processo de intrusão de mercúrio em um espaço poroso, para um dado estágio de invasão associado à pressão P_{itr} , deve satisfazer as condições:

i) $P_{itr} \geq \left(- \frac{2\sigma \cos \alpha}{r} \right)$, condição de tamanho de poro;

ii) Acessibilidade dos poros à fase de mercúrio, dependente da conectividade do espaço poroso.

6.3. Renormalização

Apenas com o intuito de se observar o funcionamento da técnica de renormalização — utilizada por Neimark (1989) e Daian (1992a, 1992b), para a resolução do problema de percolação na estrutura multiescala —, apresenta-se um apanhado geral das idéias contidas na teoria de grupo de renormalização. Para o conhecimento dessa teoria pode-se recorrer a Maris e Kadanoff (1978), Reynolds et alii (1980) e Stauffer (1985).

Considere-se como exemplo, uma rede de percolação randômica, constituída de sítios, como ilustrada na figura 6.2.a. A idéia básica da teoria de renormalização consiste em transformar uma rede original, como a da figura 6.2.a, em uma rede renormalizada, onde a distância entre dois sítios vizinhos (a constante de rede) é "b" vezes maior que a da original, e onde são mantidas as propriedades estatísticas de conectividade entre os sítios, veja-se ilustração na figura 6.2.b. Em outras palavras, a rede renormalizada deve conservar a estrutura topológica da rede original.

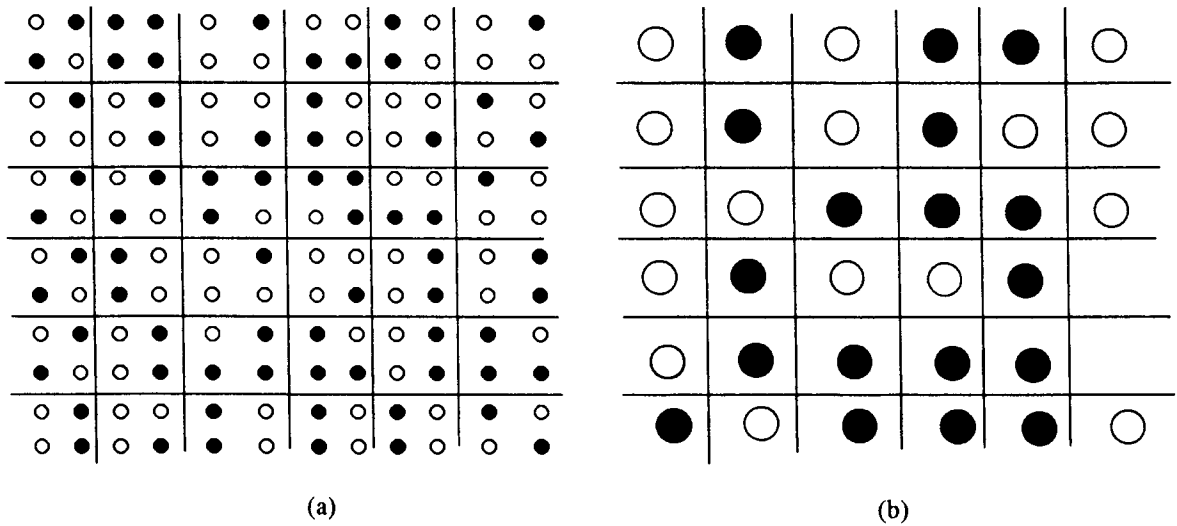


Figura 6.2. Ilustração para o procedimento de renormalização. Em (a) tem-se a rede de sítios original. Em (b) a rede renormalizada.

A renormalização é definida por uma função $p' = R(p)$, onde p e p' são as proporções de sítios ativos nas redes original e renormalizada, respectivamente. Baseado no exemplo da figura 6.2, formula-se um tipo de regra de renormalização bastante simples. Diz-se que um agrupamento de quatro sítios na rede original será transformado em um super-sítio ativo na rede

renormalizada caso ocorra a existência de pelo menos dois sítios ativos na rede original formando um caminho percolante (no sentido de atravessar o agrupamento) nas direções vertical ou horizontal, estando excluída a direção diagonal no agrupamento. Dessa forma, pode-se conseguir uma expressão analítica para a procurada função de renormalização, dada por esta simples regra, considerando-se as configurações possíveis de sítios ativos no agrupamento de quatro sítios. Essas configurações são mostradas na figura 6.3.

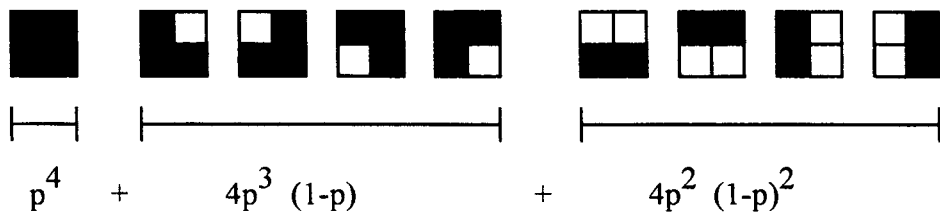


Figura 6.3. As configurações possíveis para os sítios ativos no agrupamento, dada por uma simples regra de renormalização.

Com esta regra de renormalização, para uma proporção p de ocupação na rede original, os super-sítios na rede renormalizada serão ocupados de acordo com a probabilidade $p' = p^4 + 4p^3(1-p) + 4p^2(1-p)^2$.

A idéia mais geral, no sentido de se manter a topologia da rede original, consiste em se considerar a invariância no comprimento de correlação, ou de conexão, como melhor definido por Gouyet (1992). O comprimento de conexão, denotado por ξ , é função da proporção de ocupação p , $\xi = \xi(p)$, sendo expresso em termos da constante de rede. Ele está relacionado com o tamanho médio dos agrupamentos finitos, dando uma idéia da distância média, à qual se faz sentir a conectividade.

Do ponto de vista prático, uma boa regra de renormalização, no sentido de manter a topologia da rede original, deve considerar, Philippi (1994):

i) A invariância do ponto crítico:

$$(p^*)' = (p^*)$$

ii) Invariância do comprimento de conexão:

$$\xi'(p') = \frac{\xi(p)}{b}$$

iii) Similaridade: A ilha percolante da rede original deve apresentar a mesma dimensão fractal da ilha percolante da rede renormalizada.

O fator crucial no processo de renormalização consiste, na definição de uma boa regra de renormalização, tarefa esta não simples. Daïan (1992a, 1992b) construiu uma regra particular de renormalização a partir do conhecimento da função de renormalização em três pontos específicos: $p = p_c$, o limite de percolação, $p \rightarrow 0$ e $p \rightarrow 1$. Os pontos intermediários da função de renormalização foram determinados através de uma interpolação polinomial.

6.4. Resolução do Problema de Intrusão de Mercúrio no SME através da Renormalização. Daïan (1992a, 1992b)

Considere-se um SME de Daïan, como apresentado no capítulo anterior, e um estágio de invasão k , o qual denota uma pressão de intrusão de mercúrio, onde todos os poros das classes 1 até k são potencialmente possíveis de serem preenchidos (pois atendem a condição de diâmetro) restando a condição de acessibilidade dos poros com a fase líquida. Para a escala de índice k , a proporção de poros possíveis de serem preenchidos é dada por p_k . A renormalização da escala k (com um fator $b=2$, da maneira como é constituído um SME) conduz a uma proporção de ocupação $p_k' = R(p_k)$. Dessa forma, a superposição da escala de índice k com a escala de índice $k - 1$, fornece a proporção de ocupação:

$$\pi_{k-1}^k = p_{k-1} + (1 - p_{k-1})R(p_k) \quad (6.2.)$$

O termo π_{k-1}^k designa a proporção de ocupação da escala $k - 1$, para o estágio k de invasão.

O procedimento de renormalizações sucessivas conduz à expressão de recorrência:

$$\pi_i^k = p_i + (1 - p_i)R(\pi_{i+1}^k) \quad (6.3.)$$

A equação anterior nos possibilita determinar para o estágio de invasão k a proporção π_1^k , da primeira escala (a dos maiores poros). Após as renormalizações sucessivas, a primeira escala permite um tratamento do problema de percolação em um sistema monoescala com o tamanho finito da rede considerada.

Resta agora, a determinação do volume de mercúrio efetivamente invadido em cada classe, para o estágio de invasão k . Daian (1992a, 1992b) considera um poro da classe $i \leq k$, procurando a probabilidade que nas sucessivas renormalizações, o poro seja pertencente a um agrupamento condutivo da próxima escala, não sendo encoberto pelo processo de superposição, e que pertença a um agrupamento invadido da primeira classe. Através da equação (6.2.), ele calcula o volume dos poros da classe i , efetivamente invadidos para o estágio k , através da seguinte equação:

$$v_i^k = p_i(\pi_{i-1}^k - p_{i-1}) \dots (\pi_1^k - p_1) \frac{P_N(\pi_1^k)}{\pi_1^k} \quad (6.4.)$$

Nesta equação, o termo $P_N(\pi_1^k)$ designa a probabilidade de um sítio pertencer ao agrupamento percolante em uma rede finita de tamanho N para a proporção de ocupação π_1^k , parâmetro este brevemente descrito na introdução deste trabalho.

A equação (6.4.) contém, implicitamente, uma hipótese e uma aproximação. Avaliar o volume v_i^k , para um estágio $k > 1$ significa obter o número de células ativas da escala i que pertencem ao agrupamento percolante na escala 1. Ora, para um estágio de invasão $k > 1$ no agrupamento percolante existirão células da escala 1 e células renormalizadas das demais escalas, não sendo possível uma separação dessas células por classe. Assim, para avaliar, por exemplo, o número de células da escala 1 pertencentes ao agrupamento percolante, faz-se a

hipótese de igualdade entre as razões: (número de células ativas *da* escala 1/ número de células ativas *na* escala 1) e (número de células ativas *da* escala 1 e percolantes/ número de células ativas *na* escala 1 e percolantes). Note-se "número de células ativas *na* escala 1" se refere às células da escala 1 mais as células que foram renormalizadas até a escala 1. Para as células das classes $i > 1$ o volume v_i^k é multiplicado por p_i para levar em conta apenas as células da classe i . Isto consiste em uma aproximação, uma vez, que se está considerando todo o universo de p_i e não apenas as células da classe i que foram renormalizadas.

6.5. Simulação Numérica do Processo de Intrusão de Mercúrio em SME

A resolução do problema de invasão de mercúrio, como formulada na seção anterior, depende fundamentalmente de dois elementos: a adoção de uma boa regra de renormalização e o conhecimento da probabilidade de percolação $P_N(\pi_1^k)$. Além disso, devem ser consideradas as aproximações na equação (6.4.). Neste trabalho, optou-se por uma simulação numérica do processo de invasão diretamente no SME gerado.

Para um estágio de invasão k , associado a uma pressão de intrusão P_{itr}^k , todos os poros das classes do SME com índices $i \leq k$ são possíveis de serem invadidos, uma vez que satisfazem a condição de diâmetro, devendo ser verificada a condição de acessibilidade à fase de mercúrio para a efetiva ocupação dos poros. Procede-se a simulação, a partir da primeira classe de diâmetros (associada aos maiores poros), que corresponde a uma pressão de intrusão P_{itr}^1 , aumentando-se progressivamente a pressão de intrusão de forma a tornar possível a penetração de mercúrio nos poros das classes de índices 2, 3, ..., i , ..., n .

O processo de geração das escalas, e a ocupação efetiva dos poros com mercúrio são realizados concomitantemente. Inicialmente, é gerada a primeira classe, de poros de tamanho d_1 , que para este estágio de invasão P_{itr}^1 , são possíveis de serem preenchidos, restando verificar a acessibilidade com a fase de mercúrio. Procede-se a geração da segunda classe, estágio de invasão P_{itr}^2 , e agora os poros da segunda e primeira classes são possíveis de ocupação. O procedimento segue sucessivamente até os menores poros, estágio de invasão P_{itr}^n , onde neste estágio todos os poros do sistema são possíveis de ocupação sujeitos à condição de acessibilidade.

Para cada estágio k de invasão, não se necessitam das informações das classes de índices $i > k$, quer dizer, estas classes não precisam estar presentes na rede, uma vez que não atendem a condição de diâmetro, não havendo a possibilidade de penetração de mercúrio. Podemos dizer, que para um estágio de invasão k , os poros das classes $i > k$, se comportam em relação à fase de mercúrio como se fossem matriz sólida; o mercúrio não enxerga esses poros, que são pequenos para o dado estágio de invasão. Claramente, a geração de uma classe de poros menores, o que implica num dado estágio de invasão, pode criar condições de acessibilidade, para os poros maiores não preenchidos em estágios de invasão anteriores.

Realizou-se a simulação de intrusão de mercúrio, na imagem reconstituída em SME da pasta de ligantes da argamassa, imagem de aumento de 3200X, figura 2.2. A geração do SME foi feita diretamente a partir das frações de volume das classes medidas na imagem original com a operação de abertura, considerando-se cinco classes de diâmetros, com as frações v_i , como dadas na tabela 6.1.

Tabela 6.1. As frações de volume para a imagem da pasta de ligantes.

Escala i	Diâmetro (Å)	Fração de Volume
5	1250	0.0247
4	2500	0.0477
3	5000	0.1219
2	10000	0.1766
1	20000	0.1005

pg 32

Utilizaram-se redes de 128x128x128 e de 256x256x256 células para a quinta classe. A intrusão é realizada sobre estes domínios cúbicos, onde todas as faces exteriores são consideradas como matriz sólida, à exceção de uma que é colocada como a fase de mercúrio. O sistema é assumido ter sido submetido inicialmente ao vácuo.

A acessibilidade para cada estágio de intrusão, ou seja, a procura do agrupamento percolante de fase mercúrio pode ser determinada pelo algoritmo de rotulação, como feito no capítulo 2., para a detecção de estreitamentos entre cavidades. Contudo, isto implica na

manipulação computacional de números inteiros (2 bytes). Optou-se pela procura do agrupamento percolante através do algoritmo que testa a vizinhança dos poros a partir da superfície de mercúrio. Para tanto, realizam-se várias passagens na rede, alternando as passagens nos caminhos de cima para baixo e da esquerda para a direita com de baixo para cima e da direita para a esquerda, até que não haja mudanças na configuração da fase de mercúrio. Este procedimento se torna mais demorado que aquele associado ao algoritmo de rotulação (que necessita de apenas uma passagem na rede), entretanto, nos permite trabalhar manipulando variáveis caracteres (1 byte), ocupando dessa forma menos memória no computador. O tempo de processamento, exigido nas simulações de intrusão de mercúrio, é de aproximadamente 2 horas para as redes $128 \times 128 \times 128$ e de aproximadamente 6 horas para redes $256 \times 256 \times 256$, utilizando-se uma máquina Sun- SPARCstation LX.

Antes de apresentar os resultados obtidos com a simulação numérica do processo de intrusão de mercúrio no SME tridimensional para a pasta de ligantes, mostra-se a simulação em um SME bidimensional fictício, composto de quatro escalas.

Na figura 6.4.a, mostra-se a primeira classe gerada (a dos maiores poros), sendo invadidos pelo mercúrio os poros em contacto com a fase de mercúrio, representada na linha superior do sistema. No segundo estágio de intrusão, figura 6.4.b, o aparecimento de poros da segunda escala, agora possíveis de serem invadidos, permite que poros da primeira escala, que no estágio anterior eram inacessíveis ao mercúrio, sejam invadidos. No terceiro estágio de intrusão, figura 6.4.c, o mercúrio atravessa o sistema, e diz-se que, o sistema percolou. No quarto estágio de intrusão, figura 6.4.d, alguns poros que são acessíveis são ainda preenchidos com mercúrio. Contudo, uma fração de volume de poros permanece vazia, por não estar conectada ao restante do espaço poroso.



Figura 6.4.a. O primeiro estágio de intrusão de mercúrio no SME. Os poros (fase preta) invadidos por mercúrio correspondem à fase vermelha.

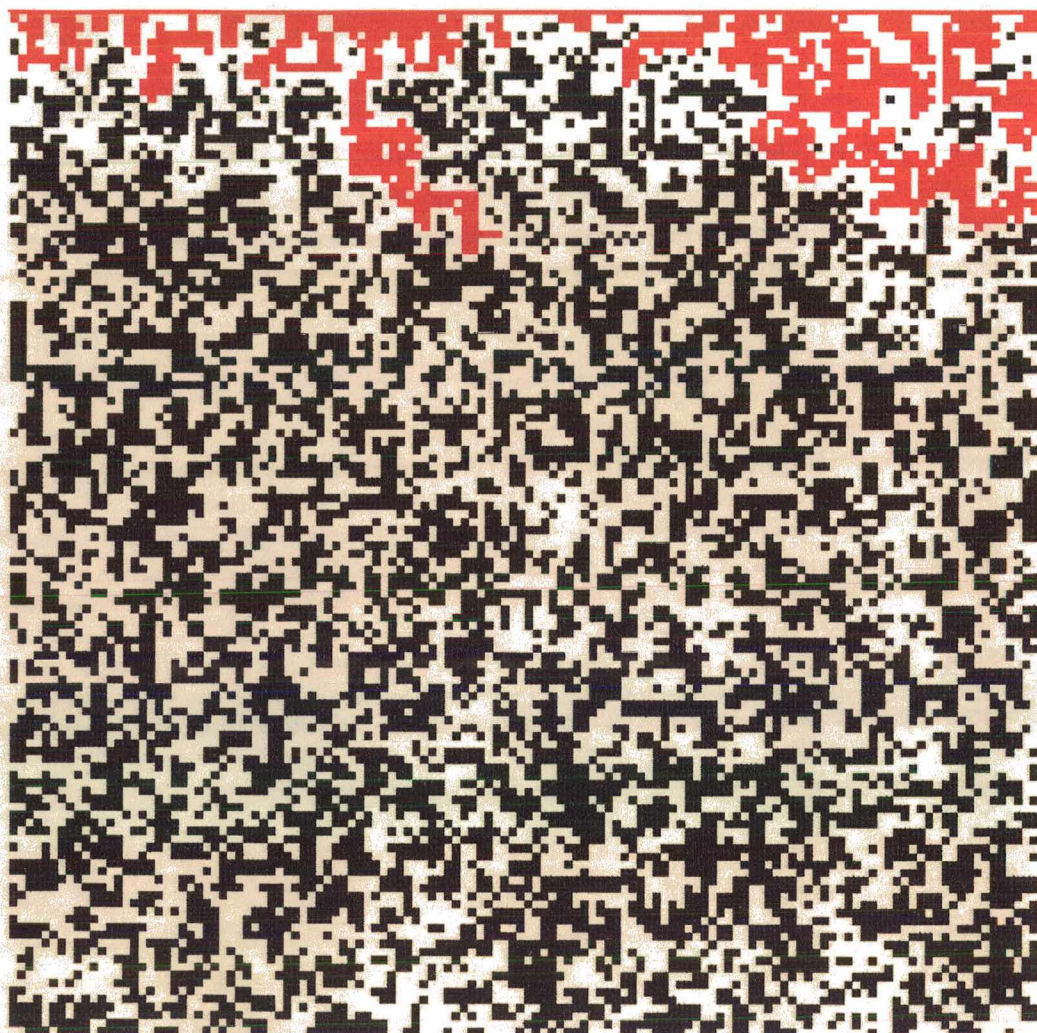


Figura 6.4.b. O segundo estágio de intrusão de mercúrio no SME. Os poros (fase preta) invadidos por mercúrio correspondem à fase vermelha.

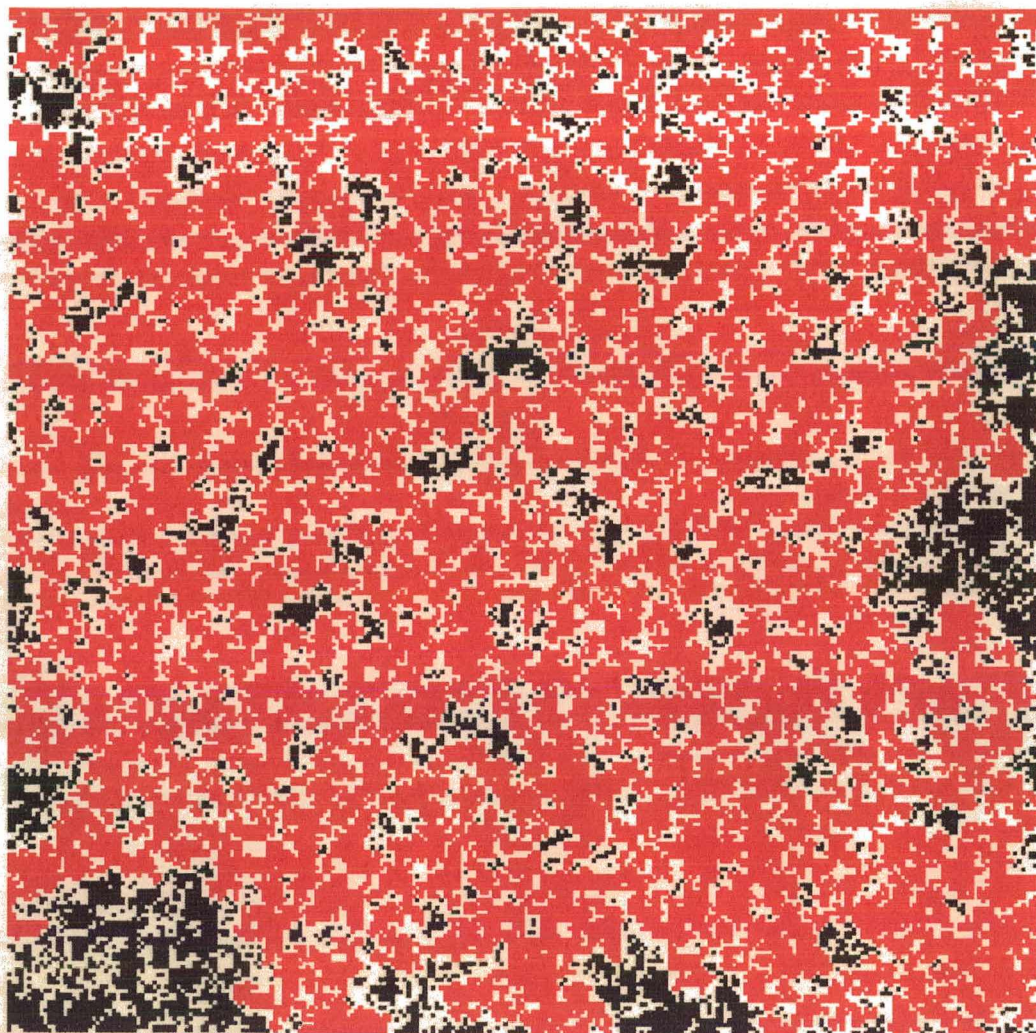


Figura 6.4.c. O terceiro estágio de intrusão de mercúrio no SME. Os poros (fase preta) invadidos por mercúrio correspondem à fase vermelha. Neste estágio ocorreu a percolação da fase de mercúrio.

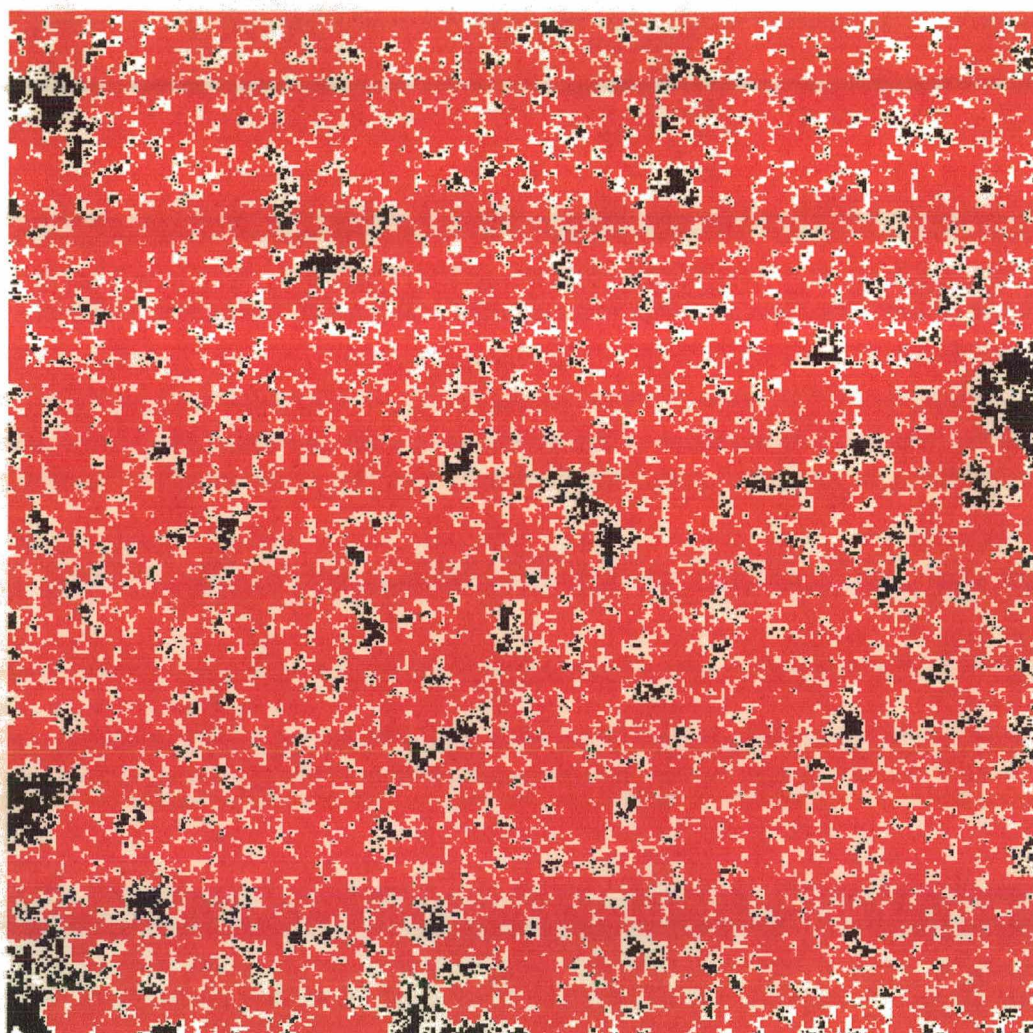
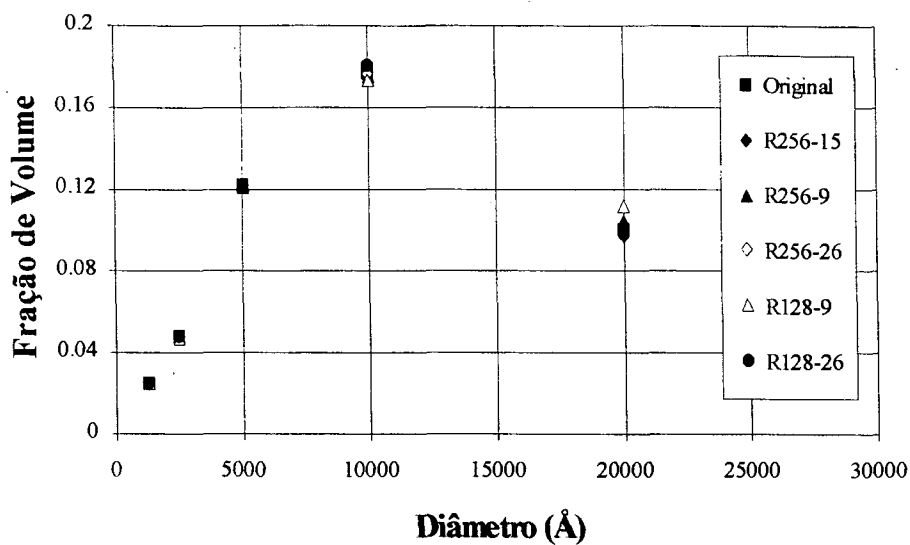


Figura 6.4.d. O quarto estágio de intrusão de mercúrio no SME. Os poros (fase preta) invadidos por mercúrio correspondem à fase vermelha. Uma fração da porosidade não é invadida, uma vez que não é conectada ao restante do espaço poroso.

6.6. Resultados Obtidos na Simulação de Intrusão de Mercúrio em SME Tridimensional

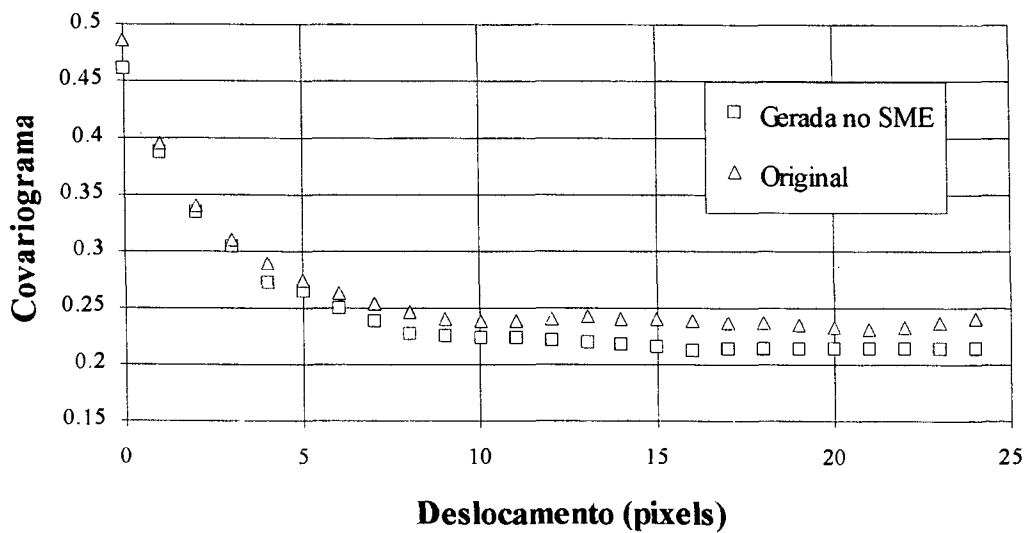
Na figura 6.5 são apresentados os resultados de fração de volume gerados por escala, em comparação com os valores originais de frações de volume dados na Tabela 6.1., em redes $128 \times 128 \times 128$ e redes de $256 \times 256 \times 256$ células para a quinta classe. Para o mesmo tamanho de rede, o parâmetro variável é a semente do gerador aleatório.



pg 38

Figura 6.5. Comparação dos volumes originais e gerados em SME para redes 128x128x128 e 256x256x256. A legenda R256-15, se refere à simulação em rede de tamanho 256x256x256, com semente do gerador aleatório igual a -15.

Na figura 6.6 mostram-se os resultados de covariograma para um SME 256x256x256 em comparação com os valores medidos na imagem original de aumento de 3200X. A concordância se apresenta bastante boa, como já observado no capítulo anterior para SME bidimensional.



pg 38

Figura 6.6. Os covariogramas medidos no SME tridimensional e na imagem original de aumento 3200X.

Na figura 6.7 mostram-se os resultados de volume de mercúrio efetivamente invadido por classe, em função do diâmetro de poro. Os resultados são apresentados para várias simulações em redes de 128x128x128 e 256x256x256, onde em cada simulação (para o mesmo tamanho de rede) o parâmetro variável é a semente do gerador aleatório.

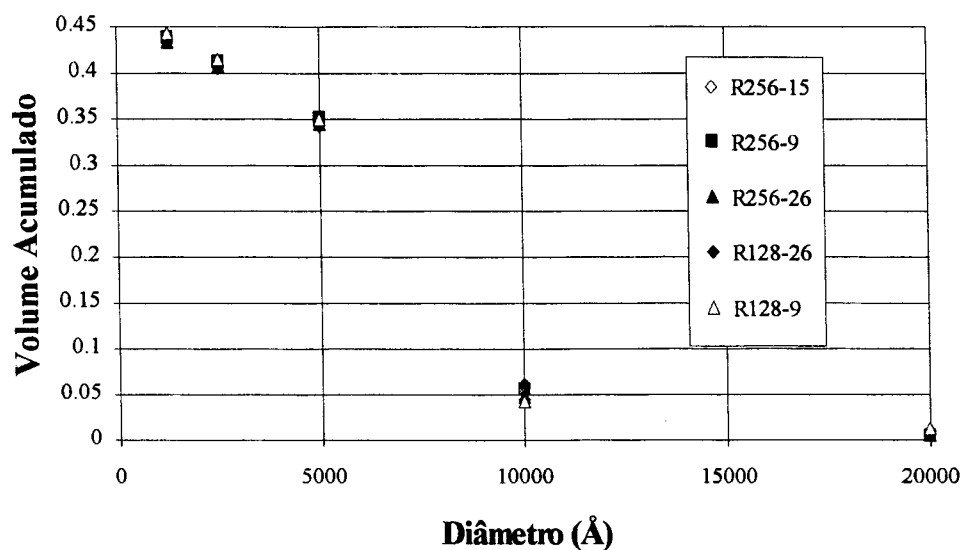


Figura 6.7. O volume de mercúrio invadido no SME da pasta de ligantes.

6.7. Comparação dos Resultados Simulados com os Experimentais

Deseja-se, nesta seção, comparar os resultados de invasão de mercúrio obtidos com a simulação em SME da pasta de ligantes com aqueles experimentais. Neste trabalho, não foi possível a simulação do processo de invasão de mercúrio na imagem associada à escala de fissuras, uma vez que, a reconstituição desta imagem em SME não apresenta comportamento satisfatório, como visto no capítulo anterior. Com o fim de comparar os resultados de invasão na pasta de ligantes, faz-se primeiramente a hipótese de que todo o espaço poroso associado à imagem de aumento de 200X, o que compreende o complexo de fissuras bem como os macroporos da dada escala, esteja conectado e já invadido pelo mercúrio, que para pressões mais elevadas irá invadir a pasta de ligantes. Com esta hipótese, os valores de volume de mercúrio, fornecidos pela invasão dos poros da pasta de ligantes, devem ser adicionados da fração de volume de poros correspondente à imagem de aumento de 200X, que é de 0.1065.

Nesta operação de adição, o volume de mercúrio intruso na pasta de ligantes deve ser multiplicado por 0.29, que é a fração de volume da pasta de ligantes na imagem de aumento 200X. Uma segunda hipótese é a de que apenas as fissuras sejam conectadas na imagem de 200X, estando os macroporos desconectados. Neste caso, enquanto não ocorre a etapa de percolação na estrutura da pasta de ligantes, o valor a ser adicionado ao volume intruso na pasta de ligantes, se refere à fração de volume associada às fissuras, que é de 0.0530. Após a etapa de percolação, adiciona-se novamente a fração de 0.1065, imaginando-se que uma vez que o mercúrio percolou na pasta de ligantes, deve também invadir os macroporos da escala de aumento de 200X. A hipótese de que o complexo de fissuras é conectado, vem da observação da curva experimental de invasão de mercúrio, onde para pressões em torno de 0.7 Mpa, que corresponde aproximadamente ao diâmetro das fissuras, ocorre o súbito preenchimento de mercúrio no espaço poroso.

Na figura 6.8. são apresentados os resultados comparativos de invasão de mercúrio, considerando-se a hipótese de fissuras e macroporos conectados. Como a concordância dos valores de volume de mercúrio invadido nas redes, quando se varia a semente do gerador aleatório, é extremamente boa, tomaram-se apenas os resultados de uma simulação em rede de $256 \times 256 \times 256$. Os resultados experimentais de intrusão de mercúrio, foram obtidos no porosímetro do Departamento de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de São Carlos, Estado de São Paulo (Fernandes, 1990). Na figura 6.9. são mostradas as comparações dos valores experimentais e simulados, com a hipótese de macroporos desconectados.

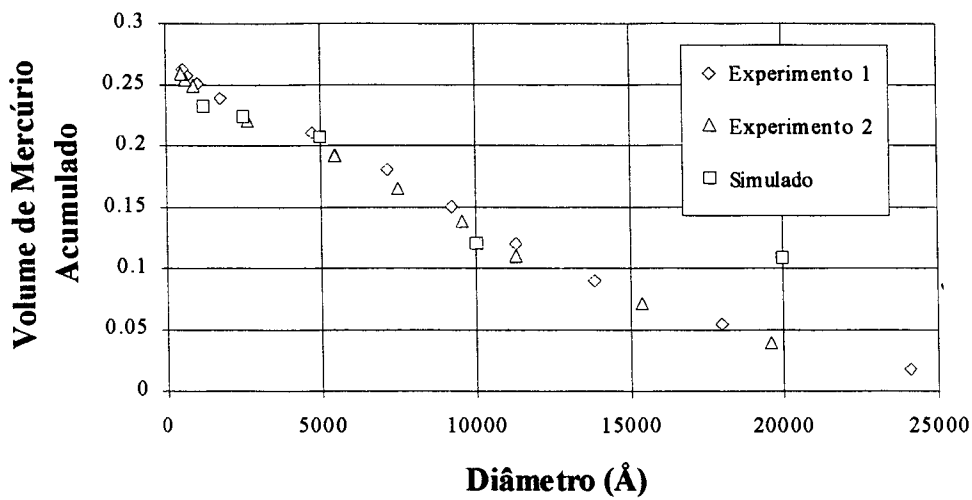


Figura 6.8. Resultados experimentais e da simulação de invasão de mercúrio em SME da pasta de ligantes. Todo o espaço poroso da imagem de aumento de 200X é suposto conectado.

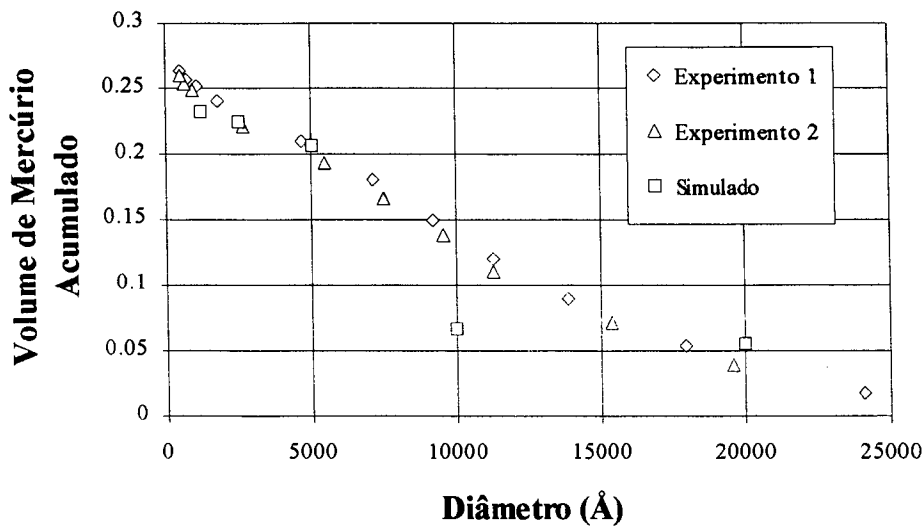


Figura 6.9. Resultados experimentais e da simulação de invasão de mercúrio em SME da pasta de ligantes. Os macroporos da imagem de aumento de 200X são conectados depois da etapa de percolação na pasta de ligantes.

Na figura 6.10, pode ser observado o comportamento das curvas simuladas de intrusão de mercúrio na pasta de ligantes, quando se consideram a estrutura multiescala e a estrutura constituída de rede randômica de percolação. A simulação em rede randômica de percolação foi realizada por Souza (1993). Os resultados de Souza (1993) apresentados na figura 6.10, foram

obtidos considerando-se o problema de percolação de sítios em redes cúbicas de tamanho 20x20x20. Os sítios são distribuídos randomicamente na rede com diâmetros de poros variando de 1000Å a 10000Å, divididos em trinta classes, obedecendo as respectivas frações de volume. A distribuição de poros foi obtida a partir de uma análise manual nas micrografias da argamassa.

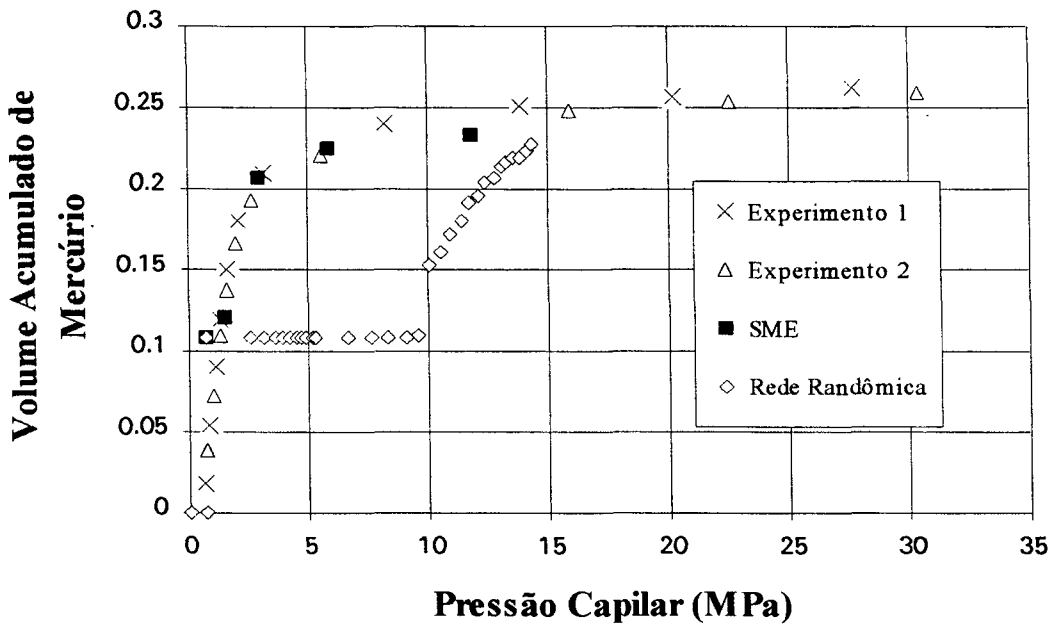


Figura 6.10. O comportamento da intrusão de mercúrio em simulações no SME e em rede randômica de percolação.

6.8. Conclusões

Os resultados obtidos na simulação do processo de intrusão de mercúrio, na estrutura da pasta de ligantes reconstituída em SME, apresentam boa concordância com os resultados experimentais o que pode ser observado nas figuras 6.8, 6.9 e 6.10. Nesta comparação, deve ser lembrada as hipóteses assumidas acerca da conectividade das fissuras e dos macroporos na escala associada ao aumento de 200X. Para uma confirmação dessas hipóteses, faz-se necessária a simulação da intrusão de mercúrio em estruturas tridimensionais da escala de aumento de 200X, o que não foi possível neste trabalho. Nós acreditamos que o bom comportamento da curva de intrusão de mercúrio obtida na simulação em SME se deve ao fato de o SME

reproduzir bem a topologia do meio original. Esta é, de fato, uma simulação bastante crua, não sendo necessário fornecer uma conectividade (como no caso de redes randômicas de percolação), uma vez que a conectividade é dada pelo próprio processo de reconstituição.

A simulação da intrusão de mercúrio em SME apresentou um comportamento bastante melhor que em redes randômicas de percolação, o que pode ser observado na figura 6.10. Com a rede randômica, o ponto de invasão ocorre para pressão de aproximadamente 10 MPa (o que equivale a um diâmetro de 1500Å). No SME o ponto de invasão está associado à pressão de aproximadamente 1.5MPa (diâmetro de 5000Å). Provavelmente esta diferença no ponto de invasão se deve ao fato de as conectividades do SME e da rede randômica não serem as mesmas. Na rede randômica a conectividade é dada pelo número de coordenação, que é constante para toda a rede.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES FINAIS

O objetivo primeiro deste trabalho de tese consistiu na caracterização de parâmetros morfotopológicos do espaço poroso de materiais. Os principais parâmetros considerados neste trabalho foram a função distribuição de volume acumulado de poros, a função autocorrelação do espaço poroso e a dimensão fractal. A determinação desses parâmetros foi realizada, com o uso de algumas técnicas de análise de imagens, sobre imagens digitalizadas e binárias, onde se definiu uma função de fase espaço poroso-matriz sólida. As imagens foram digitalizadas a partir de micrografias obtidas através de microscopia eletrônica de varredura.

Aliado à caracterização dos parâmetros estatísticos nas imagens bidimensionais, estudou-se a representação geométrica da microestrutura de materiais através de processos de reconstituição. A reconstituição visa a geração de sistemas geométricos tridimensionais, onde são conservadas as informações estatísticas da imagem bidimensional original, para a simulação de fenômenos físicos que ocorrem no seio poroso do material. A idéia básica ao se trabalhar com processos de reconstituição, é a de obter um sistema com geometria fiel ao meio real. Para este trabalho, isto é traduzido na conservação das informações de distribuição de poros e conectividade, representando um avanço em relação aos modelos de redes randômicas, onde os poros são distribuídos homogeneamente, em uma rede de geometria previamente escolhida, o que implica em um dado número de coordenação.

Neste trabalho, a atenção foi voltada para a microestrutura de uma argamassa de cal e cimento, a qual foi separada em duas escalas: uma associada ao complexo de fissuras e outra aos poros da pasta de ligantes. A microestrutura da argamassa se apresenta bastante complexa, com uma larga distribuição de poros: os diâmetros de poros variam de 200Å a aproximadamente 20µm. A pasta de ligantes, com diâmetros de poros até aproximadamente 2µm, mostra uma estrutura bastante interconectada, sendo correlacionada para comprimentos de escalas até aproximadamente 12500Å. Seu espaço poroso se apresenta fractal, com uma dimensão fractal de aproximadamente 1.77 (figuras 3.12 e 3.13).

Na imagem de aumento de 200X se apresenta a rede de fissuras interconectada, bem como os macroporos. Para esta escala, a dimensão fractal obtida é de aproximadamente 1.65 com a função covariograma e de aproximadamente 1.69 com o método das caixas (figuras 3.15, 3.16, 3.17 e 3.18). Estimou-se, para a escala de fissuras, comprimentos de escala da ordem de $70\mu\text{m}$ como sendo o limite de transição de meio heterogêneo para homogêneo.

Em função das características geométricas peculiares dos objetos da escala de fissuras e da pasta de ligantes, esses meios foram definidos como filiformes e orbiculares, respectivamente.

Os métodos de reconstituição de Joshi e em sistemas multiescalas (tendo as frações de volume como dados de entrada) apresentaram, para meios orbiculares, um comportamento bastante bom. Os sistemas reconstituídos reproduzem os parâmetros de porosidade, função distribuição de volumes de poros e a função autocorrelação do espaço poroso. Para a reconstituição em sistemas multiescalas, a equação CVD foi reformulada, conduzindo à equação CVDM, que apresentou melhores resultados comparativos entre os covariogramas calculados e medidos no sistema gerado. Os meios orbiculares, reconstituídos pelo método de Joshi, apresentam um aspecto visual bem mais similar à estrutura original que os meios reconstituídos em sistema multiescala. Isto ocorre, dado que no método de Joshi, a reconstituição é realizada a nível de pixel, enquanto que para o sistema multiescala a reconstituição é feita a nível de classes de diâmetros de poros, sendo assumida a geometria de um quadrado para os poros (vejam-se as figuras 4.2 e 5.9). Contudo, a simulação da invasão de fluidos em sistema multiescala é direta, uma vez que se pode facilmente separar os poros por classes, enquanto que nos sistemas reconstituídos pelo método de Joshi a simulação se torna mais difícil, necessitando a utilização de técnicas de análise de imagens como a erosão e a dilatação, o código de árvore octonária ou o gráfico da linha mediana.

Estes métodos de reconstituição, não se apresentaram adequados, quando utilizados para a imagem de aumento de 200X, um meio filiforme, muito embora tendam a reproduzir o parâmetro de entrada, a função de autocorrelação do espaço poroso ou a função distribuição de volume de poros.

A reconstituição em sistemas multiescala, apresenta como principal limitação o crescimento do tamanho de poros em potência de dois, a partir do diâmetro dos poros menores.

A simulação de processos de intrusão de mercúrio na estrutura da pasta de ligantes, reconstituída em sistema multiescala, apresentou resultados com boa concordância em relação aos valores experimentais (figuras 6.8, 6.9 e 6.10). A simulação da intrusão de mercúrio em sistema multiescala apresentou um comportamento bastante diferente que a simulação em redes randômicas de percolação (figura 6.10). Justifica-se o melhor comportamento do sistema multiescala em função de se ter melhor reproduzidas as informações de conectividade.

Para o prosseguimento deste trabalho, algumas idéias são colocadas:

- Aprimoramento dos processos de preparação e observação microscópica, de modo a se obter micrografias da pasta de ligantes, no espectro poroso de diâmetros menores que 1250Å.
- Estudo de processos de reconstituição para meios filiformes. No método de reconstituição de Joshi eventualmente a consideração de mais momentos da função de fase resolva este problema.
- No modelo multiescala, pode-se tentar a geração de cada classe não aleatoriamente, mas correlacionada.
- Um estudo teórico geral, visando a compreensão de uma possível relação entre os parâmetros de autocorrelação e função distribuição de poros, relação esta sugerida quando se considerou o sistema multiescala.
- No presente trabalho foram obtidas as dimensões fractais das imagens da pasta de ligantes e da escala de fissuras. Pode-se realizar um estudo visando caracterizar uma possível relação entre o caráter fractal do meio e os fenômenos de fixação e transferência de umidade.
- Simulação de fenômenos de migração de umidade na estrutura multiescala. Uma vez resolvido o problema de reconstituição da escala de fissuras, seria possível a simulação em toda a estrutura da argamassa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ADLER, P. M. Fractal porous media III: transversal Stokes flow through random and Sierpinski carpets. **Transport in Porous Media**. v. 3, p.185-198, 1988.
- ADLER, P. M.; JACQUIN, C. G.; QUIBLIER, J. A. Flow in simulated porous media. **Int J. Multiphase Flow**. v. 16, p.691-712, 1990.
- ADLER, P. M. **Porous Media. Geometry and Transports**. USA, Butterworth-Heinemann, 1992.
- AURIAULT, J. L.; BOUTIN, C. Deformable porous media with double porosity. Quasi-statics. I: Coupling effects. **Transport in Porous Media**. v. 7, p.63-82, 1992.
- BARRET, E. P.; JOYNER, L. G.; HALENDA, P. P. The determination of the pore volume and area distributions in porous substances. I: computations from nitrogen isotherms. **Journal of the American Chemical Society**. v. 73, p.373-380, 1951.
- BROADBENT, S. R.; HAMMERSLEY, J. M. Percolation processes. I: crystals and mazes. **Proc. Cambridge Philos. Soc**. v. 53, n. 3, p. 629-641, 1957.
- CHASSERY, J. M.; MONTANVERT, A. **Géométrie discrète en analyse d'images**. Paris, Editions Hermes, 1991.
- CHATZIS, I.; DULLIEN, F. A. L. Modelling pore structure by 2-D and 3-D networks with application to sandstones. **The Journal of Canadian Petroleum**. p.97-108, 1977.

Mise en oeuvre de la théorie de la percolation pour modéliser le drainage des milieux poreux et la perméabilité relative au liquide non mouillant injecté. **Revue de L' Institut Français du Pétrole**. v.37, n.2, p.183-205,1982.

CHILDS, E. C.; COLLIS-GEORGE, N. The permeability of porous materials. **Proc. Royal Soc.** London. v. 201, p.392- 405, 1950.

COSTER, M.; CHERMANT, J. L. **Précis d'analyse d'images**. Presses du CNRS, 1989.

CRAUSSE, P. **Etude fondamentale des transferts couplés de chaleur et d'humidité en milieux poreux non saturé**. Thèse Doctorat ès-Sciences, Toulouse, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1983, 2 volumes, 209p. de texto mais figuras.

CUNHA NETO, J. A. B. **Transport d'humidité em matériau poreux en présence d'un gradient de température. Caractérisation expérimentale d'un béton cellulaire**. Thèse de Docteur, Grenoble, Université Joseph Fourier - Grenoble I, 1992, 194p.

DAIAN, J. F. **Processus de condensation et de transfert d'eau dans un matériau meso et macroporeux. Etude expérimental du mortier de ciment**. Thèse Docteur-ès-Sciences Physique, Grenoble, Université Scientifique, Technologique et Médicale de Grenoble, 1986, 319p.

From pore-size distribution to moisture transport properties: particular problems for large pore-size distributions. **IDS'92. 8th Int. Drying Symp.** Montréal. 19p., 1992a.

Modélisation des phénomènes de transport en milieux poreux par reseaux de pores: problemes de structure. **Seminaire LCPC/CNRS**. Orléans, 1992b.

Comunicações Interpessoais.1992c.

- DE VRIES, D. A. Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media. **Transactions of the American Geophysical Union**. v.39, n.5, p.909-916, 1958.
- DELFINER, P.; ÉTIENNE, J.; FONCK, J.M. Application de l'analyse des textures a l'étude morphologique des réseaux poreux en lames minces. **Revue de L'Institut Français du Pétrole**. p.535-547, 1972.
- ESSAM, J. W. Percolation theory. **Rep. Prog. Phys.** v.43, p.833-912, 1980.
- FERNANDES, C. P. **Estudo dos processos de condensação e migração de umidade em meios porosos consolidados. Análise experimental de uma argamassa de cal e cimento.** Dissertação de Mestrado, Florianópolis, Depto de Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 1990.
- FISHER, M. E., ESSAM, J.W. Some cluster size and percolation problems. **Journal of Mathematical Physics**. v.2, n.4, p.609-619, 1961.
- GOUYET, J.F. **Physique et structures fractales**. Paris, Masson, 1992.
- HOSHEN, J.; KOPELMAN, R. Percolation and cluster distribution. I.- Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. **Physical Review B**. v.14, n.8, p.3438-3445, 1976.
- JACQUIN, C. G.; ADLER, P. M. Fractal porous media II: Geometry of porous geological structures. **Transport in Porous Media**. v.2, p.571-596, 1987.
- JENNINGS, H. M. Design of high strength cement based materials: Part 2 microstructure. **Mat. Sci. Technol.** v.4, p285-290, 1988.

- JORGE, L. A. C.; DURAND POSADAS, A.; LIRA, L. O.; CRESTANA, S. Algoritmo para cálculo da dimensão fractal de estruturas porosas através de processamento de imagens. **Anais do XX Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos**. v1, p.155-166, 1992.
- JOSHI, M.Y. **A class of stochastic models for porous media**. Ph.D. Thesis, Univ. of Kansas, Lawrence, KS, 1974.
- KATZ, A. J.; THOMPSON, A. H. Fractal sandstones pores: implications for conductivity and pore formation. **Physical Review Letters**. v.54, n.12, p.1325-1328, 1985.
- KIRKPATRICK, S. Percolation and conduction. **Reviews of Modern Physics**. v.45, n.4, p.574-588, 1973.
- KNAB, L.I.; WALKER, H. N.; CLIFTON, J. R.; FULLER JR., E.R. Fluorescent thin sections to observe the fracture zone in mortar. **Cem. Concr. Res.** v.14, p.339-344, 1984.
- KUELKAMP, N. **Introdução à topologia geral**. Florianópolis, Editora da Universidade Federal de Santa Catarina, 1988.
- LANGE, D. A.; JENNINGS, H. M.; SHAH, S. P. A fractal approach to understanding cement paste microstructure. **"Advances in Cementitious Materials"**. Washington, 1990.
- LAURENT, J. P.; MOSCHETTO, C.; MONTANVERT, A. Une méthode optimisée de granulométrie par analyse d'images. **Colloque "Contrôle de Qualité par Vision Artificielle", Le Creusot**. 9p, 1993.
- LAURINDO, J. B. **Comunicações Interpessoais**, 1994.

LENORMAND, R. **Déplacements polyphasiques en milieu poreux sous l'influence des forces capillaires - Etude expérimentale et modélisation de type percolation.** Thèse de Doctorat d'État, Toulouse, Institut National Polytechnique de Toulouse, 327p., 1981.

LUIKOV, A. V. **Heat and mass transfer in capillary -porous bodies.** Pergamon Press Ltd. 1966.

MANDELBROT, B. B. **The fractal geometry of nature.** New York, W. H. Freeman, 1982.

MAGNANI, F. S. **Comunicações Interpessoais**, 1994.

MARIS, J. H.; KADANOFF, L. P. Teaching the renormalization group. **Am. J. Phys.** v.46, n.6, p.652-657, 1978.

MARSHALL, T. J. A relation between permeability of porous materials. **Journal of Soil Science.** v.9, n.1, p.1-8, 1958.

MASON, G. The effect of pore space connectivity on the hysteresis of capillary condensation in adsorption-desorption isotherms. **Journal of Colloid and Interface Science.** v.88, p.36-46, 1982.

MASON, G. Determination of the pore size distributions and pore space interconnectivity of vycor glass from adsorption-desorption hysteresis capillary condensation isotherms. **Proc. R. Soc. Lond.** A415, p.453-486, 1988.

MEAKIN, P. Computer simulation of growth and aggregation processes. **On Growth and Form: Fractal and non-fractal patterns in physics.** Edited by Stanley, H. E. and Ostrowsky, O. NATO ASI Series E, Martinus Nijhoff Publishers, Boston, p.111-135, 1986.

- MEROUANI, L. **Phénomènes de sorption et de transfert d'humidité dans des matériaux du bâtiment. Etude expérimentale comparative d'un mortier de ciment et d'un enduit de façade.** Thèse Docteur 3^{ème} Cycle, Grenoble, Institut National Polytechnique de Grenoble, 180p., 1987.
- MONTANVERT, A. **Contribution au traitement de formes discrètes: squelettes et codage par graphe de la ligne médiane.** Thèse USTMG et INPG, Grenoble, 1987.
- MOSCHETTO, C. **Caractérisation de la structure poreuse des matériaux par analyse d'images: apport des distances discrètes à la morphologie mathématique.** Rapport de Stage, LTHE, Grenoble, 49p., 1991.
- MAYAGOITIA, V.; JAVIER CRUZ, M.; ROJAS, F. Mechanistic studies of capillary processes in porous media. Part 1. - Probabilistic description of porous media. **J. Chem. Soc., Faraday Trans.** v.1, n.85, p.2071-2078, 1989a.
- MAYAGOITIA, V.; JAVIER CRUZ, M.; ROJAS, F. Mechanistic studies of capillary processes in porous media. Part 2. - Construction of porous networks by Monte-Carlo methods. **J. Chem. Soc., Faraday Trans.** v.1, n.85, p.2079-2086, 1989b.
- NASH, J. C. **Compact numerical methods for computers. Linear algebra and function minimisation.** Adam Hilger, 1989.
- NEIMARK, A. V. Multiscale percolation systems. **Sov. Phys. JETP.** v.69, n.4, p.786-791, 1989.
- PARLAR, M.; YORTSOS, C. Percolation theory of vapor adsorption-desorption processes in porous media. **J. of Colloid and Interface Science.** v.124, n.1, p.162-176, 1988.

- PAULON, V. A.; MONTEIRO, P. J. M. Estudo da microestrutura da zona de transição entre a pasta de cimento e o agregado. **Boletim Técnico BT/PCC/43**. Universidade de São Paulo, São Paulo, 1991.
- PEDRINI, A.; PHILIPPI, P. C.; CRUZ, J. A.; FERNANDES, C. P. Caracterização de Meios Porosos. **Relatório Técnico 1/91, SITERPA, Depto de Eng. Mecânica, UFSC**. 1991.
- PERRIN, B. **Etude des transferts couplés de chaleur et de masse dans des matériaux poreux consolidés non saturés utilisés en génie civil**. Thèse Docteur D'Etat, Toulouse, Université Paul Sabatier de Toulouse, 1985. 267p.
- PHILIP, J. R.; DE VRIES, D. A. Moisture movement in porous material under temperature gradients. **Transactions of the American Geophysical Union**. v.38, n.2, p.222-232, 1957.
- PHILIPPI, P. C. **Microestrutura dos materiais porosos usados em edificações e sua influência sobre os processos de fixação e transferência de umidade**. Monografia para o Concurso de Professor Titular do Departamento de Eng. Mecânica da UFSC. 1991.
- PHILIPPI, P. C. **Notas de Aula. Disciplina: Tópicos Especiais em Ciências Térmicas: Teoria da Percolação**. Departamento de Engenharia Mecânica da UFSC. 1994.
- PHILIPPI, P. C.; YUNES, P. R.; FERNANDES, C. P.; MAGNANI, F. S. The microstructure of porous building materials: study of a cement and lime mortar. **Transport in Porous Media**. v.14, p.219-245, 1994.
- PIERITZ, R. A. **Dissertação de Mestrado em Desenvolvimento**, Florianópolis, Depto de Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 1994.

POSADAS DURAND, A. N.; CRESTANA, S. Teoria "fractal" e técnicas de imagem na caracterização da infiltração instável em um meio poroso não-saturado. **Anais do XIX Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos**. v1, p.117-129, 1991.

POSADAS DURAND, A. N. **Estudo do Fenômeno "Fingering" em um Meio Poroso através de Imagens e Teoria da Percolação por Invasão**. Tese de Doutorado, São Carlos, Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, 1994.

PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T. **Numerical recipes in C**. Cambridge University Press, 1988.

QUADRI, M. B. **Dinâmica de resposta de tensiômetros: desenvolvimento experimental e modelação numérica**. Dissertação de Mestrado, Florianópolis, Depto de Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 1988.

QUENARD, D. **Adsorption et transfert d'humidite dans les materiaux higroscopiques. Approche du type percolation et experimentation**. Thèse Docteur, Toulouse, Institut National Polytechnique de Toulouse, 198p. mais anexos. 1989.

QUIBLIER, J. A. A new three-dimensional modeling technique for studying porous media. **J. of Colloid and Interface Science**. v.98, p.84-102, 1984.

RENAULT, P. **Étude et modélisation du coefficient de diffusion en phase gazeuse en fonction de la morphologie de l'espace poral textural des sols cultivés**. Thèse Institut National Polytechnique de Toulouse, 1988.

RENAULT, P. The effect of spatially correlated blocking-up of some bonds or nodes of a network on the percolation threshold. **Transport in Porous Media**. v. 6, n.4, p.451-468, 1991.

REYNOLDS, P. J.; EUGENE STANLEY, H.; KLEIN, W. Large-cell Monte Carlo renormalization group for percolation. **Physical Review B**. v.21, n.3, p.1223-1245, 1980.

SALIBA, J. **Propriétés de transfert hydrique du mortier de ciment: modélisation à l'échelle macroscopique des effets dynamiques des hétérogénéités**. Thèse de Doctorat, Grenoble, Université Joseph Fourier, 1990, 295p.

SHANTE, V. K. S.; KIRKPATRICK, S. An introduction to percolation theory. **Adv. Phys.** v.20, p.325-354, 1971.

SOUZA, H. A. **Estudo dos processos de fixação e transferência isotérmica de umidade em meios porosos heterogêneos**. Tese de Doutorado, Florianópolis, Depto de Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 1993.

STAUFFER, D. **Introduction to percolation theory**. Londres, Editora Taylor & Francis, 1985. 121p.

SYKES, M. F.; ESSAM, J. W. Some exact critical percolation probabilities for bond and site problems in two dimensions. **Physical Review Letters**. v.10, n.1, p.3-4, 1963.

Critical percolation probabilities by series methods. **Physical Review**. v.133, n.1A, p.A310-A315, 1964a.

Exact critical percolation probabilities for size and bond problems in two dimensions. **Journal of Mathematical Physics**. v.5, n.8, p.1117-1127, 1964b.

- THIEL, E. **Amélioration des distances du chanfrein. Construction de la ligne médiane et décomposition des formes.** Mémoire de DEA, Grenoble, Institut de Mécanique de Grenoble, 1991.
- VAN DER KOOI, J. **Moisture transport in cellular concrete roofs.** Ph.D. Thesis, Eindhoven Univ. of Technology, Waltman, Delft, 1971.
- VICSEK, T. **Fractal growth phenomena.** Word Scientific Publishing, 2.ed., s.l., 1992. 508p.
- WALL, G. C.; BROWN, R. J. C. The determination of pore-size distributions from sorption isotherms and mercury penetration in interconnected pores: the application of percolation theory. **J. of Colloid and Interface Science.** v.82, n.1, p.162-176, 1981.
- WEITZ, D. A.; OLIVERIA, M. Fractal structures formed by kinetic aggregation of aqueous gold colloids. **Physical Review Letters.** v.52, n.16, p.1433-1436, 1984.
- WITTEN, JR., T. A ; SANDER, L. M. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. **Physical Review Letters.** v.47, n.19, p.1400-1403, 1981.
- YUNES, P. R. **Determinação da distribuição de poros de uma argamassa de cimento e cal usando as isotermas de equilíbrio e dados de microscopia eletrônica.** Dissertação de Mestrado, Florianópolis, Depto de Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.

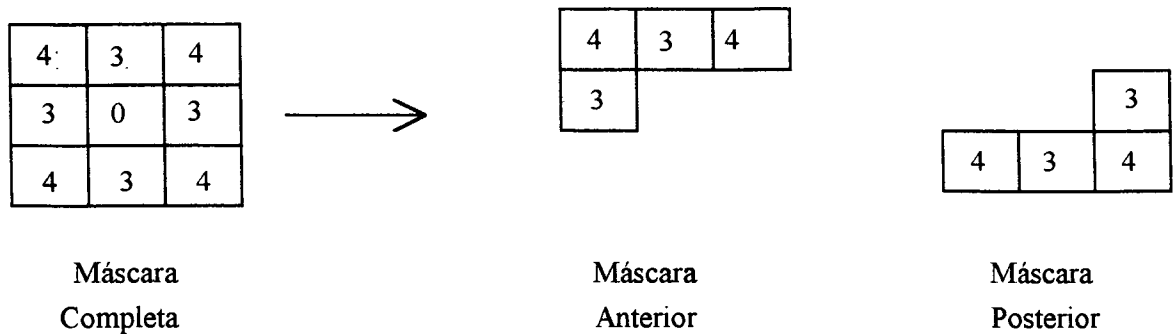


Figura A.2. Decomposição da máscara d_{3-4} nas semi-máscaras anterior e posterior.

Para calcular os valores de imagem de distância ao fundo (IDF) para cada ponto (i,j) de uma imagem $IMG(i,j)$, — assumindo valores 0 (fundo) e 1 (objetos) — procedem-se duas varreduras na imagem nos caminhos denominados anterior (de cima para baixo e da esquerda para a direita) e posterior (de baixo para cima e da direita para a esquerda), utilizando-se respectivamente as semi-máscaras anterior e posterior. Inicialmente, procede-se o caminho anterior, e a semi-máscara anterior é posicionada em cada ponto (i,j) não igual a fundo, e são efetuadas as quatro adições, de acordo com as ponderações locais da semi-máscara, sendo atribuído a $IMG(i,j)$ o menor valor obtido. Depois, procede-se o caminho posterior, efetuando-se as adições de acordo com as ponderações da semi-máscara posterior, e $IMG(i,j)$ assume finalmente o menor valor entre aquele retido no percurso anterior e os valores do percurso posterior.

O algoritmo pode ser escrito de forma resumida:

Percurso anterior: de cima para baixo e da esquerda para a direita:

se $IMG(i,j)$ é não igual a fundo

fazer $IMG(i,j)$ igual ao mínimo valor das quatro adições

Percurso posterior: de baixo para cima e da direita para a esquerda:

se $IMG(i,j)$ é não igual a fundo

fazer $IMG(i,j)$ igual ao mínimo entre $IMG(i,j)$ e os valores das adições com a máscara posterior.

Um pequeno exemplo, das configurações de valores obtidos no percurso anterior e posterior (que corresponderá à imagem de distância ao fundo), é mostrado na figura A.3.

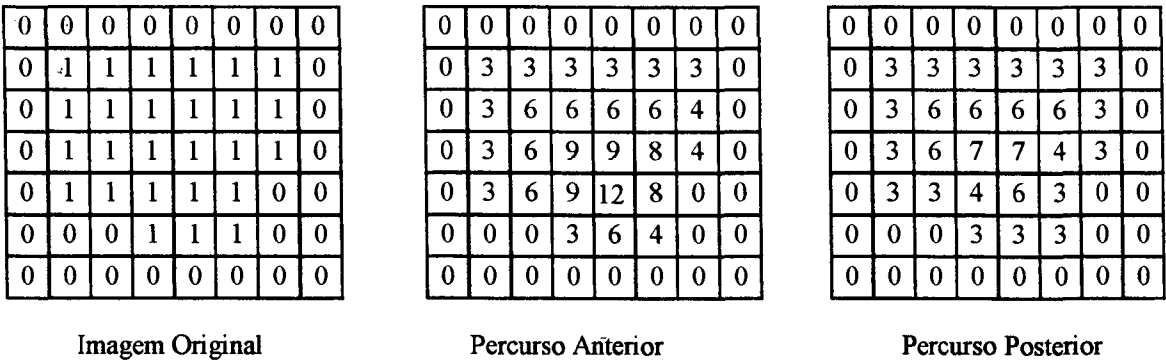


Figura A.3. Os percursos anterior e posterior para a determinação de IDF.

Deve-se notar, que para a aplicação do algoritmo de obtenção de IDF, deve ser dada a informação de que toda a fronteira da imagem corresponde a fundo.

A.3. Construção da bola de chanfro d_{3-4} .

Para a construção de uma bola de chanfro d_{3-4} de raio R , considere-se o plano xy , com os pontos $p(x,y)$ tendo o valor de distância em relação ao ponto $(0,0)$, veja-se figura A.4. A bola centrada em $(0,0)$ é simétrica em relação aos eixos x e y . Assim, torna-se suficiente representar um quarto da bola ($x>0$ e $y>0$), deduzindo o restante da bola.

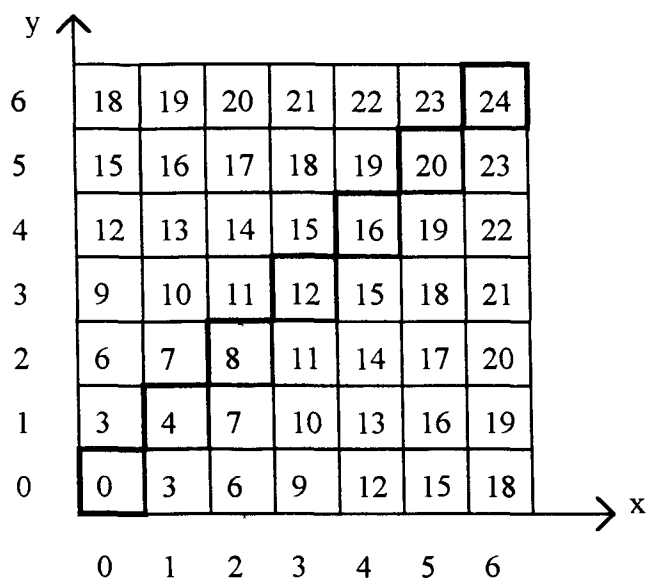


Figura A.4. O chanfro d_{3-4} .

Pode ser notado, da figura A.4 a simetria com respeito à diagonal (pontos com $x = y$), de forma que se pode dizer:

para $x = y$ vem $p(x,y) = 4x = 4y$;

para $x > y$ vem $p(x,y) = 3x + y$;

para $x < y$ vem $p(x,y) = 3y + x$.

O algoritmo de construção da matriz $M(i,j)$ representando a bola de chanfro d_{3-4} em função de seu raio R , é escrito:

para i de 1 a $2R + 1$ fazer

para j de 1 a $2R + 1$ fazer

$i' = \text{módulo}(i - R + 1)$

$j' = \text{módulo}(j - R + 1)$

se $i' = j'$ então $\text{dist} = 3i' + j'$

senão se $i' > j'$ fazer $\text{dist} = 3i' + j'$

senão $\text{dist} = 3j' + i'$

se $\text{dist} \leq 3R$ fazer $M(i,j) = 1$

senão $M(i,j) = -1$

onde $M(i,j) = 1$ são pontos da bola e $M(i,j) = -1$ são pontos externos à bola.

A matriz bidimensional $M(i,j)$ de tamanho $(2R + 1) \times (2R + 1)$ representando a bola d_{3-4} , contém valores -1 que são informações supérfluas, além do que é simétrica. A bola pode ser representada por uma matriz unidimensional de tamanho $2R + 1$. Para tanto, considere-se a representação de uma bola d_{3-4} , feita na figura A.5.

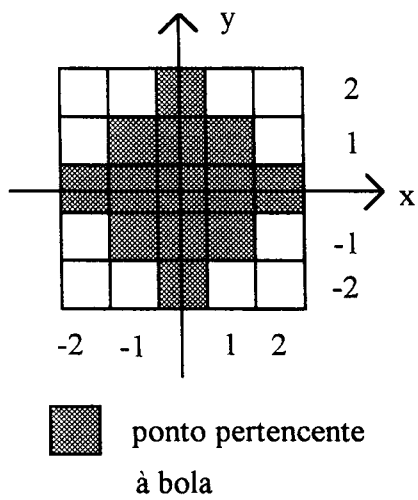


Figura A.5. Representação de uma bola d_{3-4} de raio igual a 2.

Com base na figura A.5., para cada valor de x de $-R$ a $+R$, faz-se corresponder a uma matriz $V(x)$ o valor y que é a ordenada da borda da bola na abscissa x . Assim, para este exemplo têm-se:

- $V(-2) = 0$
- $V(-1) = 1$
- $V(0) = 2$
- $V(1) = 1$
- $V(2) = 0$

O algoritmo para a geração da matriz $V(x)$ é escrito:

Inicialização da matriz

para x de 0 a R fazer $V(x) = 0$

Cálculo de $V(x)$ para $x > 0$

para x de 0 a R fazer

para y de 1 a R fazer

se $x = y$ fazer $dist = 4x$

senão se $x > y$ fazer $dist = 3x + y$

senão $dist = 3y + x$

se $dist \leq 3R$ fazer $V(x) = V(x) + 1$

Cópia de $V(x)$ para $x < 0$

para x de $-R$ a -1 fazer $V(x) = V(-x)$

A.4. O Algoritmo para a Operação de Abertura.

Para este algoritmo seja uma já codificada em distância ao fundo, $IDF(i,j)$ e uma outra matriz, chamada matriz de abertura $ABE(i,j)$, do mesmo tamanho que $IDF(i,j)$.

Inicialização da matriz de abertura

para todos os pontos (i,j) da matriz de abertura fazer

$ABE(i,j) = 0$

Cálculo da imagem submetida à abertura com bola de raio R

para todos os pontos (i,j) fazer

se $IDF(i,j) > 3 \cdot (R + 1)$ então $ABE(i,j) = 1$

senão se $IDF(i,j) > \sqrt{P} \cdot R$ fazer

para x de $-R$ a $+R$ fazer

para y de $-V(x)$ a $V(x)$ fazer $ABE(i + y, j + x) = 1$

Todos os algoritmos descritos neste apêndice foram extraídos de Moschetto (1991).